研究生数学教学系列（理工类） 12

计算流体力学的若干新方法

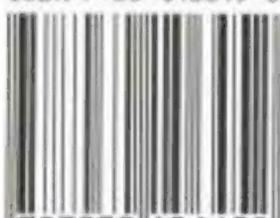
刘儒勋 舒其望 著

GM

科学出版社
www.sciencep.com

研究生数学教学系列

1. 现代科学计算
2. 工程数学基础
3. 矩阵论
4. 非线性系统的理论和方法
5. 矩阵论简明教程
6. 应用随机过程
7. 排序引论
8. 应用泛函分析
9. 数理统计（第二版）
10. 多元统计分析
11. 函数逼近论方法
12. 计算流体力学的若干新方法



ISBN 7-03-010645-8
定 价：32.00 元

研究生数学教学系列(理工类)

计算流体力学的若干新方法

刘儒勋　舒其望　著

科学出版社

北　京

内 容 简 介

本书将深入地介绍当代偏微分方程数值方法的新发展，特别是其中最具有理论意义和实用价值的间断解或弱解的数值方法，以及我们面临的新课题和挑战．例如差分方法中 Roe 的 Riemann 解算子方法、Van Leer 的 MUSCL 方法，Collela 和 Woodward 的 PPM 方法，高分辨率方法包括 TVD、TVB、ENO 和 weighted ENO 方法等等；有限体积方法，特别是间断解的非结构网格有限体积方法，以及非结构网格的生成和有关软件的应用；几种重要而有很大发展的非标准的有限元方法：混合元、时空元、间断有限元和运动元方法．特别是今天国外数值方法研究中，计算力学和计算物理课题中，非常热门的方向——活动界面追踪问题的数值模拟方法和活动界面的重构技术，本书在国内第一次比较全面地进行了讨论，并进行了实际的计算实验．本书的宗旨是面向具有一定数值方法基本知识和计算实践经验，从事科学和工程计算的科研工作者和大学本科高年级学生、研究生，介绍当代偏微分方程数值方法和计算流体力学方法的最新发展和新课题．

图书在版编目(CIP)数据

计算流体力学的若干新方法/刘儒勋，舒其望著．—北京：科学出版社，2003.4

（研究生数学教学系列（理工类））

ISBN 7-03-010645-8

Ⅰ．计… Ⅱ．①刘… ②舒… Ⅲ．计算流体力学—研究生—教材 Ⅳ．O35

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 050533 号

责任编辑：杨 波 李鹏奇／责任校对：宋玲玲

责任印制：安春生／封面设计：黄华斌 陈 敬

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码：100717

http://www.sciencep.com

新蕾印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

2003年4月第一版 开本：B5(720×1000)

2003年4月第一次印刷 印张：16

印数：1—2 500 字数：299 000

定价：32.00 元

（如有印装质量问题，我社负责调换〈新欣〉）

前　　言

当代计算科学的发展，引起或者正在引起整个科学，从内容、方法到研究手段上的改变，也将导致科学的重新分化和组合．计算科学的研究已经不能脱离具体的应用学科，因为只有这样才有生命力，才会有所开拓和创新．我们已经看到，计算科学方法在许多学科的应用、结合，展现了相关学科的新形势，形成了该学科的新方向．同样地，其他学科向计算科学的渗透，也开辟了计算科学的相应的研究方向．

计算流体力学自从20世纪60年代兴起以来，由于和流体力学的日益完美的结合，蓬蓬勃勃生机昂然．计算流体的实践极大地推动了计算科学的深化和发展，计算科学的研究和创新也为计算流体不断提供着新方法和理论依据．

非线性微分方程的数值计算和数值模拟方法，尤其是计算流体中，介质面、激波等等运动界面问题，或者间断解问题的数值模拟，是极为迫切的，也是计算流体最为困难的任务．因而这方面的计算科学新方法、新思想和理论也就应运而生，其发展和创新的势头，几乎可与计算机科学的发展媲美．

面对迅速发展的计算科学方法，特别是这些方法美妙的应用效果和实际价值，我们有一种强烈的愿望，即将他们比较系统地写出来，介绍和普及给从事科学、工程计算和进行计算机数值模拟实验的同行们，希望对他们的实际工作和研究有所帮助．但是，当真正写起来的时候，我们才真实地感到难度之大实非所想．因为其内容和方法之浩瀚，发展和更新之迅猛，使我们写出来的书稿免不了会挂一漏万，有局限片面之嫌．为此，我们除了回顾十多年来的资料积累和经验，又对近两年来的研究工作进行了全面的调研和文献的查阅，还开设了有关的研究生课程和讨论班，如“高分辨率方法和间断解问题”、“计算流体动力学方法的新发展”、“非结构网格生成方法和应用软件”、“有限体积方法”、“间断 Galerkin 有限元方法”和“运动界面追踪问题的数值方法”．作者之一——美国布朗大学应用数学系主任舒其望博士，也回国开设了有关的专题培训班“ENO 和 weighted ENO”，“间断 Galerkin 有限元方法”，等等．特别是我们的众多博士、硕士研究生，以极大的热情和效率进行了大量的实际应用计算和实践，使我们掌握了丰富的数据资料和分析结果．这一切为我们写作本书提供了大量的资料．

我们通过教学的实践，科研的实践，实际应用的实践，找到差距和缺陷，再

不断地修改、丰富和完善,目的是能够提供给读者一本有理论意义、使用价值和启发性质的计算流体力学中当代数值模拟方法的参考书.如果能够为"各行各业"同行的教学、科研和工作起到一点助益,为国家的人才培养、经济建设和高新技术的发展有所奉献,我们将得到慰藉,也会受到莫大的鼓舞和鞭策.

综上所述,本书的宗旨是为已经具有数值模拟和科学工程计算基础,特别是有初步数值模拟实践的读者,提供非线性微分方程的数值计算和数值模拟方法,特别是间断解问题和复杂现象的数值模拟方法.因而,对于计算流体、数值分析和计算方法的基本理论、格式的构造方法,譬如有限差分方法的基础理论,有限元方法的基础理论,间断解或弱解的理论,等等,将不再详细地介绍.关于这些内容读者也不难找到所需的参考书.

本书的内容着重于有限差分方法和有限体积方法类,有限元方法只是讨论了几个发展迅速、应用效果显著的非标准有限元方法,其中特别是间断Galerkin有限元和有限体积方法.至于异常重要的谱方法和正在兴起的一些新方法,限于我们的能力而不能包含,这也是一种遗憾.

具体安排是这样的:

在第一篇,介绍了有关的数学模型,有限差分方法构造和设计中的某些重要思想和概念,如特征线、特征方向和迎风(upwind)思想,间断关系(Rankine-Hugoniot jump condition)和熵条件(entropy condition, entropy inequality),以及数值方法的数值耗散和数值色散效应等.

第二篇,讨论间断解的数值方法的基本概念,这就是Glimm引入的Riemann问题概念和间断分解的思想,这是当代数值方法,特别是间断解数值方法的重要观点之一.另一种重要的概念是单元上的积分平均(cell-averaging)思想,它既是许多高分辨率方法(high resolution methods)的设计基础,也是有限体积方法和间断Galerkin有限元方法的重要思想方法.特别地,某些重要的数值方法,如Van Leer的MUSCL, Collela等的PPM方法等,正是基于这种观念进行构造的.

第三篇,比较集中地讨论了以TVD、ENO等方法为代表的高分辨率方法.其中必然涉及到TVD方法的数值通量(numerical flux)和限制函数(limiter)问题,以及ENO和weighted ENO方法的节点模板(stencil)的选择程序问题.

第四篇,针对现在发展迅速和应用广泛的非结构网格问题,介绍它的生成方法和基本思想.在非结构网格的剖分下,讨论当前应用效果明显的非结构网格有限体积方法.

第五篇,介绍几种非标准有限元方法:混合有限元、运动有限元、重要的间断Galerkin有限元方法和时空有限元(space-time FEM).其中间断Galerkin

有限元方法日益显示了它的成功和应用价值.

第六篇,介绍一个当前备受关注的热门课题——运动界面追踪问题. 扼要地讨论有关的数值模拟方法和运动界面的重构技术,以及运动界面追踪的具体应用. 今天运动界面追踪问题的数值模拟,不仅是自由面和所谓 Stefan 问题,而且关系到生物、化学和材料加工等的内在微观结构的分析和洞察.

我们很希望在每一章,甚至每一节中,能够给读者提出进一步研究和发展的启示、问题和课题. 因此,在每一章的最后,给出了有针对性的练习题,也列出了大量的参考文献,以备查阅、追踪,从而有所创新和开拓.

最后,作为附录,给出了几个 mathematics 的语言程序,用它可以生成某些实验格式的 modified PDE,利用它们来分析格式的内在性质. 也列出了许多典型格式的特征,以供查询和参考.

我们还应当向我们的诸位博士和博士后表示谢意,李宏博士仔细地整理了第八章和第十三章,这两章是作者之一在中国科学技术大学的两次课程内容,为此她付出了艰辛的劳动. 张强博士写了时空有限元方法一章,汪继文博士在有限体积方法,王志峰硕士在运动界面的追踪方法一章的编写中都给予了很大的帮助.

我们特别要感谢国家自然科学基金和火灾科学国家重点实验室知识创新工程基金的资助,正是由于他们的资助,本书方能问世.

刘儒勋　舒其望

目　　录

一、预 备 篇

这里用三章的篇幅向读者介绍某些必要的预备内容,这就是:1. 有关的数学模型,它们将是本课程从事讨论和进行计算实验的模型. 2. 简单地回顾数值方法的一些重要概念,例如差分格式的有关概念,激波等间断解的弱解条件,以及近代的新思想和新工具.

第一章 有关数学模型的简单介绍

这一章里,我们将简单地引入有关的某些数学模型,它们将是本书后面各章节所要涉及的. 今后,我们将利用它们进行格式的设计、分析和数值模拟实验,特别是利用它们作一些应用实例的计算和数值模拟的全过程的讨论.

我们采用的数学模型基本上属于两大类. 其一,线性的试验模型和非线性发展方程试验模型;其二,比较简单的实际问题数学模型. 例如气体动力学和浅水波问题模型. 在数学的表现形式上,都属于 Navier-Stokes 方程组的形式,特别是双曲型守恒律组. 除此,还将在某些章节里,根据需要引入其他的数学模型,例如 Hamilton-Jacobi 方程等.

1.1 线性试验模型[142,149]

1. 单行波方程

考虑一个最简单的偏微分方程及其 Cauchy 问题

$$u_t + au_x = h(x,t), a = \text{const} > 0. \tag{1.1}$$

$$u(x,0) = u_0(x). \tag{1.2}$$

利用特征线的分析方法,不难得到上述问题的解析解[17]

$$u(x,t) = u_0(x - at) + \int_0^t h(x - a(t - \tau), \tau) \mathrm{d}\tau. \tag{1.3}$$

在一般的情况下,我们采用的是它的齐次形式,即 $h = 0$. 在这种情况下,真解只不过是以速度 a 平移初始波形而已. 别瞧不起它的简单、平凡,利用它的特殊的、复杂的初值给定,完全可以用来检验数值方法的效果和功能.

2. 简单的抛物型方程模型

$$u_t = \nu u_{xx}, \nu = \text{const} > 0, \ |x| < +\infty, t > 0. \tag{1.4}$$

众所周知,它的初值问题 (1.4)+(1.2) 的准确解为

$$u(x,t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi\nu t}}\int_{-\infty}^{\infty} u_0(\xi)e^{-\frac{(x-\xi)^2}{4\nu t}}d\xi. \tag{1.5}$$

它是所谓的纯耗散性偏微分方程,其典型特征是解析解随着时间的进行,越来越光滑,或者说具有磨光的效应.

3. 常系数输运-扩散方程

$$u_t + au_x = \nu u_{xx}, \tag{1.6}$$

该方程作为非线性 Burgers 方程的线性化方程,用来代替 Burgers 方程,进行 Navier-Stokes 方程的简化模型试验,从而对数值计算格式作出初步的理论和可行性分析.

4. 二元,方波碰撞试验模型

$$U_t + AU_x = h, U = (u,v)^{\mathrm{T}},$$
$$A = \begin{pmatrix} 0 & a \\ b & 0 \end{pmatrix}, \ h = (0,0)^{\mathrm{T}}, \tag{1.7}$$

初值条件为

$$u_0(x) = \begin{cases} 1, & -2 \leqslant x \leqslant -1, \\ 0, & \text{其他}. \end{cases} \tag{1.8a}$$

$$v_0(x) = \begin{cases} 1, & 1 \leqslant x \leqslant 2, \\ 0, & \text{其他}. \end{cases} \tag{1.8b}$$

假设满足条件$\sqrt{ab} > 0$. 利用特征线的解析方法,也可以得到它的准确解

$$\begin{aligned} u(x,t) &= \frac{1}{2}(u_0(x-\sqrt{ab}t) + u_0(x+\sqrt{ab}t)) \\ &\quad + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{a}{b}}(v_0(x-\sqrt{ab}t) - v_0(x+\sqrt{ab}t)), \\ v(x,t) &= \frac{1}{2}(v_0(x-\sqrt{ab}t) + v_0(x+\sqrt{ab}t)) \\ &\quad + \frac{1}{2}\sqrt{\frac{b}{a}}(u_0(x-\sqrt{ab}t) - u_0(x+\sqrt{ab}t)). \end{aligned} \tag{1.9}$$

利用它可以进行一般二元非线性方程的激波等间断解方法的数值试验,分析它们的可靠性,稳定性,数值耗散性和色散性,数值群速度效应,以及其他方面

的检验. 例如,取 $a=b=1$ 时,将是一个有趣的两个方波的碰撞实验模型.

5. 流体体积函数追踪模型和 level set 函数方程[148]

在今天,自由面和活动边界问题,特别是所谓的运动界面的数值追踪模拟,日益重要和热门. 许多知名的数值数学家和科学工作者参加到这个任务中来. 而且已经提出了很多有效的数值方法,其中 VOF(volume of fluid)和 level set 方法尤其著名. 两者分别利用了流体体积函数模型和 level set 函数方程,作为运动界面追踪的一个控制方程. 它们只是主场的基本控制方程的辅助方程. 要求在计算时能够达到尽可能的高分辨率.

方程分别是

VOF 方程: $$\frac{\partial C}{\partial t}+V\cdot\nabla C=0, \tag{1.10}$$

level set 方程: $$\varphi_t+V\cdot\nabla\varphi=0, \tag{1.11}$$

其中 C 是格子内的目标介质的体积比函数, $V=(u,v,w)$ 是主场的速度向量. φ 为 level set 函数,在运动界面上它为零. 两者都是用来刻画运动界面的. 在这里我们可以把它们看成是二维的常系数方程.

1.2 非线性发展方程试验模型[48,242]

1. 无黏 Burgers 方程,也称为激波模型方程

$$u_t+uu_x=0 \quad 或者 \quad u_t+\left(\frac{u^2}{2}\right)_x=0, \tag{1.12}$$

鉴于该模型方程的 Cauchy 问题常常发展和生成间断解,特别是所谓的激波,所以通常利用它进行间断解的方法设计、分析和模拟试验. 甚至进行数值解的惟一性检验,也就是间断解的熵条件的数值研究. 例如,给定右行激波初值条件

$$u(x,0)=\begin{cases}1, & x\leqslant 0.5,\\ 0, & 其他.\end{cases} \tag{1.13}$$

那么,根据双曲型守恒律间断解的 Rankine-Hugoniot 关系[42,246],可以得到该激波的向右传播速度

$$S=\frac{[f(u)]}{[u]}=\frac{\left(\frac{1}{2}\right)-0}{1-0}=0.5. \tag{1.14}$$

根据 Lax 的理论,对于双曲型守恒方程的间断解问题,其惟一解也就是物理解,应当是它相应的黏性问题的解的极限,换句话说,就是 Burgers 方程的黏度趋向零时的极限解.

此外,如果给出以下周期为 2 的初值条件[114]

$$u(x,0) = u_0(x) = 0.25 + 0.5\sin(\pi x), \tag{1.15}$$

它的准确解应是一个运动的间断.

2. Burgers 方程

$$u_t + uu_x = \nu u_{xx} \quad 或者 \quad u_t + \left(\frac{u^2}{2}\right)_x = \nu u_{xx}, \tag{1.16}$$

它可以作为流体动力学 Navier-Stokes 方程的简单模型方程,它又可以代表浅水波问题的洪水数学模型,而且也是当代交通流动力学的模型方程. 通常,我们称之为非线性输运-扩散模型方程. 如果在输运项再引入系数 a,那么通过调节方程的两个系数,可以进行输运和扩散的效应试验. 如果采用下面的初边值条件,可以作为一种形成激波、边界层的难度很大的数值实验模型

$$u(x,0) = \frac{1}{2}\sin\pi x + \sin 2\pi x, \quad u(0,t) = u(1,t) = 0. \tag{1.17}$$

至今,我们所能够看到的最精细的数值解之一,是 Muller 等[160,161]人利用运动有限元方法所得到的.

3. Korteweg-de Vries (KdV)方程[143]

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0, \tag{1.18}$$

它是非线性发展方程,特别是孤立波的重要模型方程. 由于它具有很强的守恒性和孤立子解. 在数值方法的设计和理论分析中,利用它进行大梯度、大变形和多孤立子的碰撞试验.

其孤立子解的初值条件和解析解分别为

$$u(x,0) = 2\eta^2\mathrm{sech}^2(\eta x), \tag{1.19}$$

$$u(x,t) = 2\eta^2\mathrm{sech}^2(\eta x - 4\eta^2 t). \tag{1.20}$$

我们可以在水平面上设定一个孤立波初值,作为波浪的简化模型,进行波浪爬坡和水下障碍物造波效应的仿真数值试验.

4. KdV-Burgers 方程

$$u_t + 6uu_x + \mu u_{xxx} = \nu u_{xx}, \quad \nu,\mu \geqslant 0, \tag{1.21}$$

通过对该模型方程的理论分析和数值模拟试验,可以对于数学模型的耗散性、色散性和群速度效应进行理论分析,从而为数值方法的数值耗散性、数值色散性和数值群速度效应进行分析研究. 例如,在 Whitham 的《Linear and Nonlinear Waves》一书中,Ganosa 和 Gazdag 的论文《The Korteveg-de Vries-Burgers equation》中,都有有关它的分析. 特别是后者,从理论和数值试验两方面论证

了对于渐近的右行激波初值问题，如果

$$\nu^2 \geqslant 4\mu, \tag{1.22}$$

其解析解将是单调减的激波，即呈现耗散性优势；反之，呈现色散性优势，即解析解的激波面上，发生向上游发展的震荡.

5. RLW (regularized long wave) 方程[78]

在流体动力学、非线性光学、生物流体力学等许多领域，都可以诱导出这种模型方程

$$u_t + \eta u_x + uu_x + \delta u_{xxt} = 0. \tag{1.23}$$

同样，它也有孤立子解. 这种非线性孤立子方程，它具有一般非线性孤立子方程的特性，如在非线性项和扩散项作用下，根据动力学平衡原理，可以将初始波形分解成许多小的孤立子波，并且这些波能在传播中，甚至在碰撞后保持波形不变. 由于 RLW 方程中有 U_{xxt} 这一项，所以它比 KDV 方程更加复杂. 它的解法常常必须引入隐式差分逼近.

6. Buckley-Leverett 方程[114,160]

这是具有非凸的流通量函数(nonconvex flux)的守恒律问题.

$$u_t + f(u)_x = 0, \qquad f(u) = \frac{u^2}{4u^2 + (1-u)^2}, \tag{1.24}$$

它在多孔介质流、渗流，特别是在地下石油勘探中有一定的参考意义.

常常考察简单的初值

$$u(x,0) = \begin{cases} 1, & x \in [-0.5,0], \\ 0, & 其他. \end{cases} \tag{1.25}$$

7. 二维的无黏 Burgers 方程模型[55]

这完全是一维激波模型方程的推广

$$u_t + uu_x + vv_y = 0 \text{ 或 } u_t + \left(\frac{u^2}{2}\right)_x + \left(\frac{v^2}{2}\right)_y = 0. \tag{1.26}$$

类似地给定初值

$$u(x,y,0) = \frac{1}{4} + \frac{1}{2}\sin(\pi(x+y)), (x,y) \in [-1,1] \times [-1,1] \tag{1.27}$$

其准确解是一维类似情况以 $x+y$ 替换 x，$2t$ 替换 t 的结果.

1.3　流体动力学的某些数值模拟实验模型

关于流体动力学的基本方程,特别是 Navier-Stokes 方程的推导,在许多教科书和专著里都有讨论,不再赘述. 我们只列出有关气体动力学和浅水波问题中,人们常常采用的一些数值试验模型.

1. 气体动力学模型

(1) 激波管问题

基本方程是向量形式的守恒方程

$$U_t + F(U)_x = 0, \tag{1.28a}$$

其中

$$U = \begin{bmatrix} \rho \\ \rho u \\ E \end{bmatrix}, \quad F(U) = \begin{bmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \\ u(E + p) \end{bmatrix}, \quad E = \frac{p}{(\gamma - 1)} + \frac{1}{2}\rho u^2, \tag{1.28b}$$

这里 $\rho, u, p, E, \gamma = 1.4$ 分别为流体的密度,流体速度,压强,单位体积的总能和绝热指数.

给出左右常数状态的初值条件

$$U(x,0) = \begin{cases} U_l, & x < 0.5, \\ U_r, & x \geqslant 0.5. \end{cases} \tag{1.29}$$

这种初值的守恒律问题,称为 Riemann 问题[81,246]. 在后面我们将进行专门的讨论. 其中 Sod 的 Riemann 问题[206],其初值条件为

$$\begin{aligned} (\rho_l, u_l, P_l) &= (1,0,1), \\ (\rho_r, u_r, P_r) &= (0.125,0,0.1). \end{aligned} \tag{1.30}$$

对于 Lax 的 Riemann 问题[203,223],其初值条件则为

$$\begin{aligned} (\rho_l, u_l, P_l) &= (0.445,0.698,3.528), \\ (\rho_r, u_r, P_r) &= (0.5,0,0.571). \end{aligned} \tag{1.31}$$

上述问题通常又称为激波管问题. 许许多多的间断解方法的设计和构造,都利用这种激波管问题进行可靠性和准确度的数值试验,从而判断和检验方法和格式的优劣.

图 1.1 给出了利用间断 Galerkin 方法计算、并对其运动界面进行追踪而后得到的密度、熵、压力和速度的图形(网格数为 100,时间计算到 0.6).

(2) 孤立的接触间断问题[223]

问题的数学模型仍是 (1.27～1.29) ,其具体的 Riemann 初值条件为

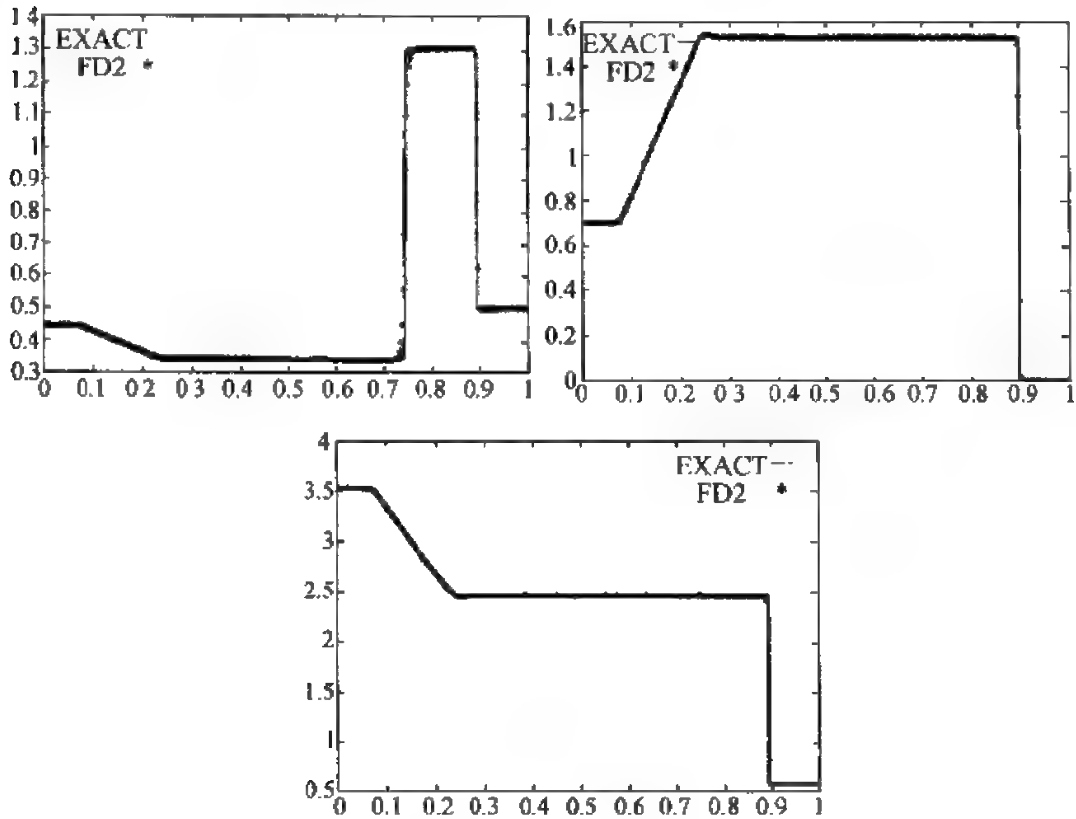


图 1.1 Lax 激波管问题

$$(\rho_l, u_l, P_l) = (1,1,0.2), \quad (\rho_r, u_r, P_r) = (2,1,0.2). \tag{1.32}$$

一般说来,对于接触间断问题,准确地进行数值模拟是具有一定难度的,所以这一气动力学的试验模型,对于设计接触间断问题的数值方法,是一个简单而方便的检测. 它的数值结果应当在密度上产生突然的跳跃,而速度和压力却保持常数.

(3) Shu-Osher 问题[114,199]

问题的数学模型仍是 (1.18~1.20),其具体的 Riemann 初值条件为

$$\begin{pmatrix} \rho \\ u \\ P \end{pmatrix} = \begin{cases} (3.857143, 2.629369, 10.33333)^{\mathrm{T}}, & x < 0.5, \\ (1 + 0.2 * \sin(50x - 25), 0, 1)^{\mathrm{T}}, & x \geqslant 0.5. \end{cases} \tag{1.33}$$

这是一种在行进的激波波头附近,嵌有不同波长震荡波的复杂情况. 特别适应于对高分辨率方法的数值检验.

(4) 微小密度和内能的 Riemann 问题[223]

问题的数学模型仍是 (1.18~1.20),其具体的 Riemann 初值条件为

$$(\rho_l, u_l, P_l) = (1, -2, 0.4), \tag{1.34}$$

$$(\rho_r, u_r, P_r) = (1,2,0.4). \tag{1.35}$$

这一试验模型的特点是密度和内能等状态量,会产生所谓的真空现象. 所以可以用来检验数值方法的守恒性、单调性和可靠性.

(5) 前台阶问题(forward facing step problem)[203~244]

首先,这是二维气体动力学间断解问题,它的一般数学模型为

$$U_t + F(U)_x + G(U)_y = 0, \tag{1.36a}$$

其中

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \\ \rho v \\ E \end{pmatrix}, \quad F(U) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho uu + P \\ \rho uv \\ u(E+P) \end{pmatrix}, \quad F(U) - \begin{pmatrix} \rho v \\ \rho vu \\ \rho vv + P \\ v(E+P) \end{pmatrix}. \tag{1.36b}$$

而单位体积的总能

$$E = \frac{P}{(\gamma - 1)} + \frac{1}{2}\rho(u^2 + v^2), \tag{1.36c}$$

这里 $\rho,(u,v),P,E,\gamma=1.4$ 分别为流体的密度,流体速度,压强,单位体积的总能和绝热指数.

所谓前台阶问题,它可以说是计算机风洞模拟实验力学的最简单模型. 假定,1 个单位宽 3 个单位长的风洞内,从左起 0.6 单位的位置开始,有高为 0.2 单位的刚性的台阶一直伸展到风洞右端. 在左侧的风洞进口处,给定 Mach 数为 3 的来流条件,内部的刚性壁面、角点条件,壁面反射条件,以及右端的出口条件等等,进行合理的设定和处理. 这样就构成了一个,特别是对于高分辨率方法的非常有效的实验模型.

图 1.2 是采用 Runge-Kutta 间断 Galerkin 方法的计算图像.

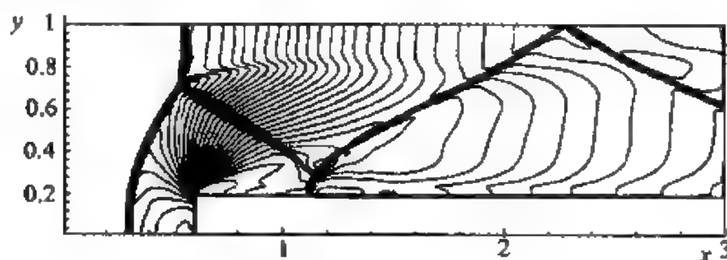


图 1.2　前台阶问题

(6) 双马赫反射(double Mach reflection)问题

数学模型同上,计算区域取为[0,4]×[0,1],反射壁面处于计算区域的底部,一个 Mach 数为 10 的斜强激波放置在 $x=\frac{1}{6}, y=0$ 处,并与 x 轴成 60°

角. 在 $x=\frac{1}{6}$ 之前的底边壁面采用准确的激波波后条件,其他壁面采用反射边界条件. 详细讨论可以参考 Woodward 和 Colella 的著名论文[244]. 图 1.3 是采用 WENO 方法计算得到的图形.

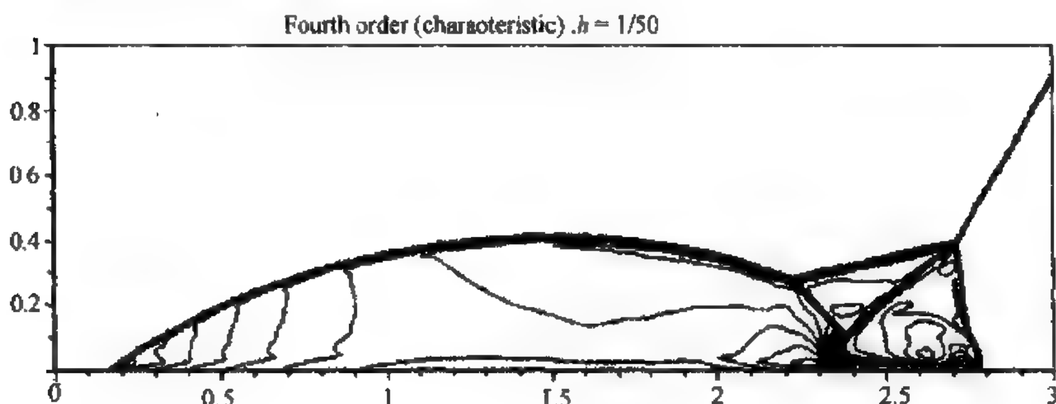


图 1.3 双马赫反射问题

(7) 激波和圆涡的相互作用模型[201,203]

数学模型同上,计算区域取为[0,2]×[0,1]. 一个垂直于 x 轴的 Mach 数为 1.1 的固定的激波置于 $x=0.5$ 处. 激波左状态为 $(\rho,u,v,P)=(1,\sqrt{\gamma},0,1)$. 并且在这里放置一个小圆涡,其中心在 $(x_c,y_c)=(0.25,0.5)$. 对于均匀流的速度 (u,v)、温度 $(T=p/\rho)$ 和熵 $(S=\ln(p\rho^{-\gamma}))$ 的一种摄动

$$\begin{aligned} \tilde{u} &= \varepsilon\tau e^{\alpha(1-\tau^2)}\sin\theta, \qquad \tilde{v} = -\varepsilon\tau e^{\alpha(1-\tau^2)}\cos\theta, \\ \tilde{T} &= -\frac{(\gamma-1)\varepsilon^2 e^{2\alpha(1-\tau^2)}}{4\alpha\lambda}, \quad \tilde{S} = 0, \end{aligned} \tag{1.37}$$

其中 $\tau=\frac{r}{r_c}$, $r=\sqrt{(x-x_c)^2+(y-y_c)^2}$. $\varepsilon=0.3$, $\alpha=0.204$ 分别代表涡团的强度和衰减率, r_c 为涡的临界半径.

2. 浅水波问题模型

(1) 一维溃坝模型[156,143]

它的基本控制方程为

$$\begin{aligned} & U_t + (F(U))_x = H, \\ & U = \begin{pmatrix} h \\ uh \end{pmatrix}, \ F(U) = \begin{pmatrix} uh \\ u^2h + \frac{1}{2}gh^2 \end{pmatrix}, H = \begin{pmatrix} 0 \\ -S \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{1.38}$$

或者采用它的拟线性形式

$$V_t + AV_x = B,$$

$$V = \begin{pmatrix} h \\ u \end{pmatrix}, A(U) = \begin{pmatrix} u & h \\ g & u \end{pmatrix}, B = \begin{pmatrix} 0 \\ -S/h \end{pmatrix}, \tag{1.39}$$

其中 h,u,和 g 分别是水深,平均流速和重力加速度. S 表示由于河道底面的倾斜,或者粗糙性引起的对流体摩擦阻力强度. 例如,Marshall 和 Menendez 在他们的一维溃坝数值模拟中,采用了无倾斜有摩擦以及既有倾斜又有摩擦的两种情况.

$$S = -gu^2/(C^2h) \text{ 和 } S = g(u^2/(C^2h) - s_0), \tag{1.40}$$

这里的 C 是 Chezy 系数,作者取为 $40 \sim 52\ \mathrm{m}^{\frac{1}{2}}/\mathrm{s}$. 而 $s_0 = 0.0009$. 刘儒勋等人(1989,1992)在溃坝模拟和孤立子爬坡的数值计算中,所采取的一维浅水波方程是拟线性的向量形式. 特别地,为了突出波面的卷起,又将水深 h 分解为波面卷起(简称波高(surface elevation))η 和波面平均水深 h_0,即

$$h = h_0 + \eta.$$

于是控制模型方程改写为

$$U_t + AU_x = H(U),$$

$$U = \begin{pmatrix} u \\ \eta \end{pmatrix}, A = \begin{pmatrix} u & g \\ \eta & u \end{pmatrix}, H = \begin{pmatrix} -\eta S \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{1.41}$$

这种形式在我们而后讨论的 Roe 的 Riemann 解算子方法中是有用的.

(2) 二维不可压流模型(2D incompressible flow)[6,236]

首先在这里列出一般的二维浅水波问题的数学模型,我们采用 Anastasiou 等人的比较紧凑的控制方程形式

$$\begin{aligned} &U_t + (F(U))_x + (G(U))_y = H(U), \\ &F(U) = F^{\mathrm{I}} - \nu F^{\mathrm{II}}, G(U) = G^{\mathrm{I}} - \nu G^{\mathrm{II}}, \end{aligned} \tag{1.42a}$$

其中

$$U = \begin{pmatrix} h \\ hu \\ hv \end{pmatrix}, \quad F^{\mathrm{I}} = \begin{pmatrix} uh \\ u^2h + gh^2/2 \\ uvh \end{pmatrix}, \quad G^{\mathrm{I}} = \begin{pmatrix} vh \\ vuh \\ v^2h + gh^2/2 \end{pmatrix},$$

$$F^{\mathrm{II}} = \begin{pmatrix} 0 \\ hu_x \\ hv_x \end{pmatrix}, \quad G^{\mathrm{II}} = \begin{pmatrix} 0 \\ hu_y \\ hv_y \end{pmatrix}, \quad H = \begin{pmatrix} 0 \\ -gh(S_{f_x} + S_{ax}) + hC_f v \\ -gh(S_{f_y} + S_{ay}) + hC_f u \end{pmatrix}, \tag{1.42b}$$

这里,u_x,v_x,…分别是 x 方向和 y 方向的流速的空间变化率,(S_{f_x}, S_{f_y})分别

是河床的摩擦效应项，而(S_{ax}, S_{ay})则是倾斜效应项. C_f 是 Coriolis 参数，v 是涡流黏度(eddy viscosity). 其中 $S_f = h^{-1}C^{-2}V|V|$，C 是 Chezy 系数.

二维不可压黏性方腔流，是一个很经典的实验模型. 一个上方开口的，各边长为一个单位的正方凹槽，内部充满了黏性不可压流体，上方有一个平板覆盖并且沿水平方向以 1 个单位的速度拖动. 方腔的其他三个壁面均为无滑移条件.

(3) 后台阶(backward step)问题

这是一个古典的实验模型问题. 如图 1.4 所示. 基本方程仍然是上述二维浅水波方程.

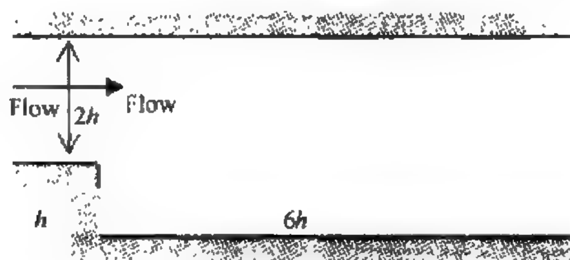


图 1.4 后台阶问题

(4) 二维溃坝问题

当前许多的水动力学数值模拟方法的研究中，常常采用这个二维溃坝模型，而且在结构和非结构网格的应用，边界条件的数值实验研究中，这个模型也很有意义. 如图 1.5 所示，长宽各为 200 单位的求解域内，水坝位于 $x=100$，其左侧水坝上游的水深 10 个单位，下游水深 5 个单位. 假定在水坝的 $y=95\to170$ 段发生突然的溃塌，利用数值方法模拟其溃流的情况.

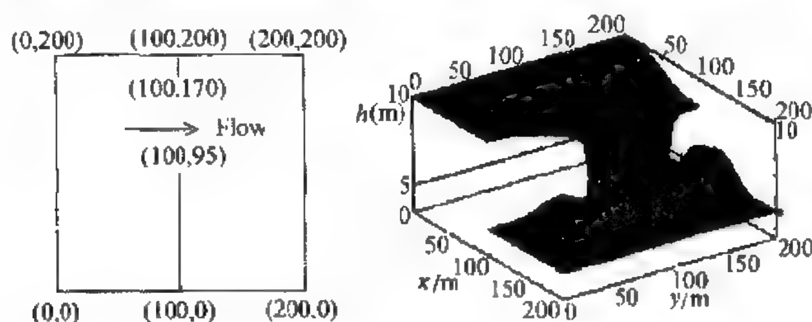


图 1.5 二维部分溃坝问题的平面图及用 FVM 方法模拟的图像

(5) 倾斜水跃问题(oblique hydralic jump)

问题的计算域是一个 40m 长的平底管道，上游入口宽度为 30m，在管道一边 10m 处开始以角度 $\theta=8.95°$ 收缩，如图 1.6 所示. 给定初始条件为 $h_0=$

10m, $u_0=8.57\mathrm{ms}^{-1}$, $v_0=0$. 入口处，采用超临界流固定边界条件，出口处采用传输边界条件，管道两边采用滑移无穿透边界条件.

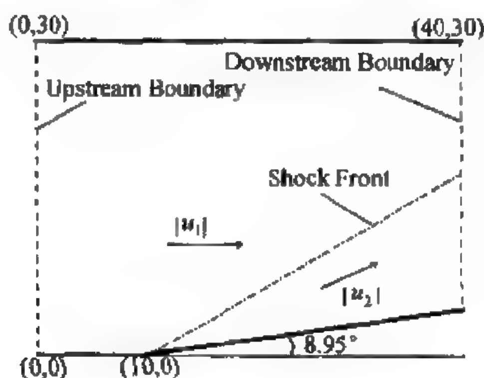


图 1.6　倾斜水跃问题示意图

练习题

1. 利用特征线的理论和方法证明单行波方程(1.1)的解为式(1.3).
2. 证明(1.7)+(1.8)的解是(1.9)式.
3. 将方程组(1.28)转化成单一未知函数向量的拟线性形式

$$V_t + A(V)V_x = 0, \tag{1.28c}$$

　　其中 $V=(\rho,u,p)^{\mathrm{T}}$,并且求出系数矩阵的特征值和相应的左右特征向量.

4. 类似地将方程组(1.36)转化成单一未知函数向量的拟线性形式

$$V_t + A(V)V_x + B(V)V_y = 0,$$

　　其中 $V=(\rho,u,v,p)^{\mathrm{T}}$,并且求出系数矩阵的特征值和相应的左右特征向量.

第二章 关于有限差分方法和其他数值方法的某些重要概念

在这一章里,我们有针对性地、高起点地和具有实用性地就差分格式的理论分析问题进行简洁而深入的回顾和讨论.

2.1 差分格式的逼近精度、相容性、稳定性和收敛性

这方面的讨论是经典的,可查阅 Richtmyer 等人的专著[181,183,246]或者有关的教科书.

相容性的讨论也是不可忽视的问题,特别是在当代的某些非线性差分格式的构造和设计中,容易造成不相容性的问题. 事实上,即使在许多常系数的差分格式的改造中,例如线性模型 (1.1) 的 Lax 格式对于 FTCS 格式的改造,扩散方程模型 (1.4) 的 Dufort-Frankel 格式对 Richardson 格式的改造. 上述两种格式的相容性,都是有时间步长和空间步长的约束的. 换句话说,即使差分格式与源微分方程是具有一定的逼近精度,相容性的问题可能还会有一定约束条件.

在经典的差分方法理论中,稳定性的讨论采用 von Neumann 的 Fourier 方法. 至于收敛性分析,则常常利用 Lax 等价定理,也归之为稳定性的讨论. 今天看来这种方法有不足之处. 其一,对于一个差分格式采用 Fourier 展开方法(或者虽然也不失一般性),简单地令节点近似值表示为单个谐波 $u_i^n = g^n \exp(ikx_i)$,进而得到时间网格层间的放大因子 (amplification factor)

$$u_i^{n+1} = g(k,\Delta t)u_i^n, \tag{2.1}$$

利用它进行稳定性分析. 这种方法,事实上并没有反映数值方法的内在特性. 事实上,我们通常在实际应用时,采用的也不是 von Neumann 稳定性的必要条件

$$\max_j |\lambda_j(g(k,\Delta t))| \leqslant 1 + O(\Delta t),\ k \in \Re, 0 < \tau \leqslant \Delta t \leqslant T, \tag{2.2}$$

而是比较强化但是可靠的条件

$$\max_j |\lambda_j(g(k,\Delta t))| \leqslant 1, k \in \Re, 0 < \tau \leqslant \Delta t \leqslant T. \tag{2.3}$$

其二,对现在发展起来的许多非线性数值方法,例如基于 Glimm[81] 的 Riemann 问题思想的方法[223],Roe 方法、MUSCL、PPM、GRP 和高阶的 Godunov 格式,特别是高分辨率方法的 TVD、ENO、weighted ENO 等等,这种经典的判稳方法已经难以实现. 所以,理论研究中又采用收敛性分析方法,或者类似于

有限元方法的 Sobolev 空间的模估计方法. 不仅如此,由于当代的有限差分方法和其他数值方法的构造和应用,已经打破了时间层的限制,更多地采用任意网格剖分,甚至是时空网格. 特别是利用 Delaunay 三角形的非结构的自适应网格生成技术,收敛性和稳定性的分析又不得不与剖分的结构、特征尺度等等紧密有关,进一步给理论分析问题带来难度. 可想而知,当代的数值方法的理论分析,显然与方法的发展和应用是不相适应的,面临的任务无疑也是相当艰巨的.

2.2 有限差分方法和其他数值方法的守恒性、单调性问题[223,251]

一个数学模型都是某一种物理实际,或者物理系统的合理的数学抽象和基本描述. 利用有限差分方法,或者其他数值方法,进行近似的数值计算和数值模拟,如果是合理又可靠的,它就应当基本上体现该物理系统的守恒性特征. 特别是,对于许许多多的物理守恒性问题提出来的所谓守恒律方程或者方程组,例如第一节中的 (1.18)、(1.28)、(1.36) 和 (1.38) 各式,数值方法的设计和构造常常要求具有守恒性的特点.

长期以来,关于有限差分方法的守恒性的讨论始终不断. 就时间依赖问题的方法而言,有限差分方法的守恒性设计,要求从守恒型数学模型出发. 在有的情况下,这种要求就有局限性. 譬如特征线类方法[246], Moretti 的 λ 格式[164]、MAC 和 PIC 等格子类(cell-type)方法[246]、以及 Roe 的 Riemann 解算子方法[184]等等,它们却由拟线性、非守恒形式出发. 所以,对于有限差分方法而言,常常不一定固守守恒性的要求. 而且,许多这样构造的差分格式效果同样很好. 这就要因实际问题和方法的特点而异. 但是,如果能够采用事后的守恒性检验,无疑是非常有意义的.

有限元方法和有限体积法,由于通常采用的是守恒的弱解形式,或者通过 Green 定理转化为边界积分形式,所以比较容易体现问题的守恒性特征.

单调性的差分格式就是指,一个满足单调条件的差分格式. 如果格式可以表示为下面的紧凑形式:

$$u_i^{n+1} = H(u_{i-l}^n, \cdots, u_i^n, \cdots, u_{i+1}^n), \tag{2.4}$$

其单调性条件即

$$\frac{\partial H}{\partial u_k^n} \geqslant 0 \ (k = l-1, \cdots, l+1). \tag{2.5}$$

单调格式能够使在大梯度、间断附近的数值计算稳定、平滑,避免产生虚假振荡.

非单调性的差分格式，常常可能产生非线性计算不稳定性，特别是在波头上产生寄生振荡．对于最简单的对流模型方程(1.1)，在今后我们会看到它的 Lax-Wendroff 格式就不是单调性的差分格式．同样，著名的 Moretti 的 λ 格式也不是单调性的格式．

即使在高级的差分格式设计，譬如 MUSCL，PPM，TVD，ENO 和 Godunov 格式的构造中，迎风思想和单调性的问题也是需要注意保持的．

一个线性的差分格式，如果它的系数是非负的，这种格式必然是单调的．有下面的两个定理．

定理 2.1 如下形式的格式

$$u_i^{n+1} = \sum_{k=-K_L}^{K_r} b_k u_{i+k}^n, \tag{2.6}$$

对于线性对流方程(1.1)而言是单调的充分必要条件是

$$b_k \geqslant 0,\ \forall k \in [-K_L, K_r]. \tag{2.7}$$

引理 格式(2.6)在时间和空间都为 $p(p\geqslant 0)$ 阶精度的充分必要条件是

$$(-c)^l = \sum_{k=-K_L}^{K_r} b_k k^l,\quad 0 \leqslant l \leqslant p, \tag{2.8}$$

其中 c 为格式的 Courant 数，$c = \dfrac{a\Delta t}{\Delta x}$．

定理 2.2 不存在二阶的线性的单调格式．

证明 记

$$S_l = (-c)^l = \sum_{k=-K_L}^{K_r} b_k k^l,\quad 0 \leqslant l \leqslant p.$$

首先，根据引理，我们从左等式有

$$S_0 = 1,\quad S_1 = -c,\quad S_2 = c^2.$$

而

$$c^2 = \sum_{k=-K_L}^{K_r} b_k k^2 = \sum_{k=-K_L}^{K_r} b_k (k+c)^2 - 2c\sum_{k=-K_L}^{K_r} b_k (k+c) - c^2 \sum_{k=-K_L}^{K_r} b_k$$

$$= \sum_{k=-K_L}^{K_r} b_k (k+c)^2 + c^2.$$

由于单调格式的充分必要条件 $b_k \geqslant 0$ 及 $(k+c)^2 \geqslant 0$，上式是矛盾的，从而得证．

2.3 差分格式和其他数值方法的迎风性设计

在流体流动的数值模型控制方程中，特别重视对流项的差分离散，强调保持流体流动的传输特征．换句话说，就是要强调具有迎风性．要求反映从上游或上风流传来的信息这个特点．从生活常识上来讲，当你突然闻到飘来的花香，你自然会迎风去搜寻．从数学上来讲，这就是要符合“特征线”的走向的差分离散处理．例如第一个模型方程 (1.1)——匀流方程中的系数，当 $a>0$，由它的准确解 (1.3) 就可以看到，空间导数项的差分逼近理应采用迎风差分离散，即采用向后差商逼近，才是比较合理的．如图 2.1 所示的差分网格中，过未知节点(x_i,t_{n+1})向下引特征线，交在 t_n 时间层的中间某点，从而空间的迎风差分逼近应当是

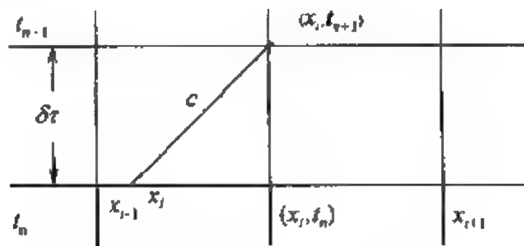


图 2.1 差分网格中的特征线走向和迎风差分

$$(u_x)_{(x_i,t_i)}=\frac{u_i^n-u_{i-1}^n}{\Delta x}+\frac{\Delta x}{2}(u_{xx})_{(x_i,t_i)}-\frac{(\Delta x)^2}{6}(u_{xxx})_{(x_i,t_i)}+\cdots \tag{2.9}$$

或者

$$(u_x)_{(x_i,t_i)}=\frac{3u_i^n-4u_{i-1}^n+u_{i-2}^n}{2\Delta x}+\frac{(\Delta x)^2}{3}(u_{xxx})_{(x_i,t_i)}-\frac{(\Delta x)^3}{4}(u_{xxxx})_{(x_i,t_i)}+\cdots. \tag{2.10}$$

从而，对于模型方程(1.1)，我们有最简单的迎风格式

$$u_i^{n+1}=u_i^n-c(u_i^n-u_{i-1}^n),\ c=\frac{a\Delta t}{\Delta x}\quad(\text{Courant 数}). \tag{2.11}$$

理论证明它是稳定的．如果按照反方向进行差分逼近，称为逆风设计，得到的差分格式通常呈现不稳定现象．因而，现在有限差分格式或者其他数值方法的构造和设计中，常常追求和实现迎风性的特征，通俗地说是要符合特征线的走向．

最近，Philip Roe[187] 考虑到 leap-frog 格式（即 central time and central space 差分逼近，简称 CTCS 格式）

$$u_i^{n+1} = u_i^{n-1} - c(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \tag{2.12}$$

不存在数值耗散的优点，但是它的数值色散效应或者数值群速度效应很强．作者利用了迎风性思想进行改造，即选择了新的迎风性的节点模板（stencil），（如图 2.2(a)）所示．并且对单行波模型方程(1.1)采用如下逼近

$$\frac{\frac{1}{2}[(u_i^{n+1} - u_i^n) + (u_{i-1}^n - u_{i-1}^{n-1})]}{\Delta t} + a\frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} = 0,$$

从而得出了迎风型的 Leap-frog 格式

$$u_i^{n-1} = u_{i-1}^{n-1} - (1 - 2c)(u_i^n - u_{i-1}^n), \tag{2.13}$$

其效果十分明显．它既保持了 L-F 格式的高精度、弱数值耗散性，又具有迎风性，克服了在间断和大梯度附近出现虚假振荡，以及在第三章将会了解的波形错位的问题．它的节点采用了图 2.2(a)的四节点模板，而不是简单迎风格式(2.11)的上面三节点模板．如果再增加 t_n 时间层的左右两个节点（如图 2.2(b)所示），甚至可以设计更好的、更高阶的迎风型的 leap-frog 格式[118]．详见下一节的讨论．

图 2.2 利用迎风思想扩展节点模板设计高阶 L-F 格式

同样，在高精度的各种有限差分方法构造中，特别是高分辨率方法，也常常采用迎风的思想．例如，ENO 方法的节点模板（stencil）选择．不仅如此，在有限元方法和有限体积法的设计中，今天也在利用这种迎风思想，从而设计出迎风型有限元方法等．

作为一个重要的内容，我们就一般的流体力学守恒型方程组，介绍迎风的离散逼近方法．对于类似于（1.18）～（1.20）的一个一般一维问题，可以写在拟线性形式

$$U_t + AU_x = 0, \quad A = \frac{\partial f(U)}{\partial U}, \tag{2.14}$$

$$U(x,0) = \begin{cases} U_l, & \text{如果 } x < 0.5, \\ U_r, & \text{如果 } x \geqslant 0.5. \end{cases} \tag{2.15}$$

在大多数实际情况下，Jacobi 矩阵 A 有两两互异的特征值和线性无关的特征向量组

$$\lambda_1 \leqslant \lambda_2 \leqslant \cdots \leqslant \lambda_m, \ w_1, w_2, \cdots, w_m, \tag{2.16}$$

并且存在一个非异的矩阵 T，使得

$$T^{-1}AT = \Lambda = \begin{pmatrix} \lambda & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_m \end{pmatrix}. \tag{2.17}$$

我们如果设定

$$\begin{aligned} \lambda_i^+ &= \max(\lambda_i, 0) = \frac{1}{2}(\lambda_i + |\lambda_i|), \\ \lambda_i^- &= \min(\lambda_i, 0) = \frac{1}{2}(\lambda_i - |\lambda_i|), \end{aligned} \tag{2.18}$$

显然有

$$\begin{aligned} &\lambda_i = \lambda_i^+ + \lambda_i^-, \ \Lambda = \Lambda^+ + \Lambda^-, \ |\Lambda| = \Lambda^+ - \Lambda^-, \\ &A^\pm = T\Lambda^\pm T^{-1}, \ A = A^+ + A^-, \ |A| = A^+ - A^-, \end{aligned} \tag{2.19}$$

其中，

$$T^{-1}A^\pm T = \Lambda^\pm = \begin{pmatrix} \lambda_1^\pm & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \lambda_m^\pm \end{pmatrix}. \tag{2.20}$$

利用以上的结果，一种简单的、一阶迎风格式可以得到

$$U_i^{n+1} = U_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(A^+ \nabla U_i^n + A^- \Delta U_i^n) \tag{2.21}$$

或者

$$V_i^{n+1} = V_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(\Lambda^+ \nabla V_i^n + \Lambda^- \Delta V_i^n), \ V = T^{-1}U. \tag{2.22}$$

这里我们采用了文献[246]中的向后差分和向前差分的记法

$$\nabla f_i = f_i - f_{i-1}, \ \Delta f_i = f_{i+1} - f_i. \tag{2.23}$$

此外，也可以利用左特征向量将方程变化为沿特征线的局部积分形式，采用局部的离散逼近构造迎风格式．今后我们将进行比较详细的讨论．

上面的讨论，同样也可以推广到二维问题(1.36)、(1.42)，届时更多的采用分数步方法，或者说空间方向交替方法．

在今后介绍的特征积分型格式、TVD、ENO、有限体积法和间断有限元方法的讨论中，我们将不断地看到迎风性方法设计的特点和风格．

2.4 间断解,或者弱解的一些重要概念[132,42,46,246]

首先考虑一个间断解的模型方程,即第一章里的激波模型方程

$$u_t + uu_x = 0 \quad 或 \quad u_t + \left(\frac{u^2}{2}\right)_x = 0. \tag{2.24}$$

一般说来,即使给定的初值条件非常光滑,它的解也可能发展成间断或激波.其实,这是无耗散性的非线性方程的一般特性.因而,间断解的理论研究和数值模拟就显得特别重要和有实际意义.

1. 间断关系——Rankine-Hugoniot relationship

对于一般守恒型方程,又称为守恒律问题

$$u_t + (f(u))_x = 0, \tag{2.25}$$

其间断点或者激波的传播速度满足如下的间断关系

$$\begin{aligned} &S[u] = [f(u)], \\ &[f(u)] = f(u_r) - f(u_l), [u] = u_r - u_l, \end{aligned} \tag{2.26}$$

其中 S 为间断或者称为激波的传播速度,[*] 表示其内函数在间断点或激波的左右两侧值的跳跃、或者变差. 关系式(2.26)称为 Rankine Hugoniot jump condition 或 Rankine-Hugoniot relationship.

例如,前面的激波模型方程 (2.24),如果是下面的初值条件

$$u(x,0) = \begin{cases} 1, & x \leqslant 0, \\ 0, & x > 0. \end{cases} \tag{2.27}$$

该条件本身就是一个间断或者称为激波. 那么它的准确解也是激波,其传播速度为

$$S = \frac{\left[\frac{u^2}{2}\right]}{[u]} = \frac{\frac{1}{2} - 0}{1 - 0} = 0.5. \tag{2.28}$$

同样地,对于激波管问题和溃坝问题的守恒型控制方程而言,一般也可以利用间断关系进行数值方法的理论研究和分析,或对数值方法进行检验和判断.

2. 间断解或弱解的熵增条件(entropy condition)

根据弱解理论,数学上的间断解问题,其解是不惟一的. 最简单的例子就是激波模型方程 (2.24) 和反向的激波初值条件

$$u(x,0) = \begin{cases} 0, & x \leqslant 0, \\ 1, & x > 0, \end{cases} \tag{2.29}$$

它的解可以是中心稀疏波的形式,又可以是所谓的发散激波情况这样两种解.但是,从物理实际上,所谓的发散激波是根本不应当存在的,因为它违反了热力学的基本事实——一个不可逆热力学过程必然是熵增的,即应当满足熵增条件.

Lax 提出这种熵增条件的一种直观的、等价的数学解释,这就是 (2.24) + (2.29) 的惟一的物理解,应当是下述相应问题 (2.30) + (2.29) 的解的极限

$$u_t + uu_x = \varepsilon u_{xx}, \tag{2.30}$$

也就是说

$$\lim_{\varepsilon\to 0} u_\varepsilon(x,t) = u(x,t). \tag{2.31}$$

同样的讨论对于 (2.25) 的间断解,应当是下述问题的极限解:

$$u_t + (f(u))_x = \varepsilon u_{xx}. \tag{2.32}$$

关于数值解熵增条件的研究专著和论文非常多,也有各种形式的熵条件.其中最重要的是前苏联数学家 Oleinik 熵增条件.例如,对于标量守恒律的间断解问题 Oleinik 的熵条件为

$$\begin{gathered}\frac{f(u_r)-f(u)}{u_r-u} \leqslant S \leqslant \frac{f(u_l)-f(u)}{u_l-u},\\ u\in(\min(u_l,u_r),\max(u_l,u_r)),\end{gathered} \tag{2.33}$$

它事实上是物理的熵增条件

$$f'(u_r) \leqslant S \leqslant f'(u_l) \tag{2.34}$$

的一种差商表示.

1971 年 Lax 给出了另一种形式的熵条件.

如果存在 u 的一个凸函数 $U(u)$ 称为熵函数,和一个 u 的连续可微函数 $F(u)$,称为熵通量函数,满足相容条件

$$\frac{\partial}{\partial t}U(u) + \frac{\partial}{\partial x}F(u) = 0,\ U'(u)f'(u) = F'(u), \tag{2.35}$$

称 (U,F) 为熵对.设对于任意 $\varphi\in C_0^\infty(R\times R^+)$,$\varphi(x,t)\geqslant 0$,则熵条件为

$$-\iint_{\geqslant 0}[\varphi_t U(u) + \varphi_x F(u)]\mathrm{d}x\mathrm{d}t \leqslant 0, \tag{2.36}$$

或者在弱意义下

$$\frac{\partial U(u)}{\partial t} + \frac{\partial F(u)}{\partial x} \leqslant 0. \tag{2.37}$$

对于数值解过程,适当的数值耗散性,是我们能够得到真正的物理解的根本保证.因此,在数值计算或者数值模拟间断解问题时,必然要引入一定而合理的耗散性效应.这也就是为什么过去曾经长期研究所谓人工黏性项和人工

黏性方法的原因.

3. 何谓 Riemann 问题和 Riemann 问题列

求解间断问题,就应当具有间断的观点,这是显而易见的. Glimm 在 1965 年就提出了间断分解的思想,或者说 Riemann 问题的概念. 一个最简单的例子就是 (2.15~2.16) 这样的左右间断常数的间断分解问题. 一般的提法是

$$
\begin{aligned}
&U_t + f(U)_x = 0,\\
&U(x,0) = U_0(x) = \begin{cases} U_l, x \leqslant 0, \\ U_r, x > 0, \end{cases}\\
&U = (u_1,\cdots,u_k)^{\mathrm{T}}, f(U) = (f_1(u),\cdots,f_k(u))^{\mathrm{T}}.
\end{aligned}
\tag{2.38}
$$

数值解的许许多多高分辨率方法,诸如 Chorin 的 RCM、Van Leer 的 MUSCL, Roe 方法、Collela 的 PPM (分段抛物线方法)、Godunov 方法,以及 Harten 等人提出和发展的 TVD、TVB 和 ENO 等等,它们几乎都采用了这种 Riemann 间断解的思想. 即将每一时间层差分网格的中间点,都看作是这种间断分解的 Riemann 问题,或者说是在每个时间层上,由网格上的积分平均定义了一个阶梯的函数分布[7-10],从而构成了每一个时间层上的 Riemann 问题列.

$$U_t + f(U)_x = 0, x_i^n \leqslant x \leqslant x_{i+1}^n, t_n \leqslant t \leqslant t_{n+1}. \tag{2.39}$$

$$U(x,t_n) = \begin{cases} U_i^n, & x_i \leqslant x \leqslant x_{i-\frac{1}{2}}, \\ U_{i+1}^n, & x_{i+\frac{1}{2}} \leqslant x \leqslant x_{i+1}, \end{cases} \quad i = 1,2,\cdots,I. \tag{2.40}$$

应当指出,近代的高分辨率方法,一般采用网格上的积分平均来定义节点函数值,即

$$
\begin{aligned}
&U_i^n = \frac{1}{h_{i+\frac{1}{2}}}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} U(x,t_n)\mathrm{d}x,\\
&h_{i+\frac{1}{2}} = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}},
\end{aligned}
\tag{2.41}
$$

从而形成了时间层上的一种阶梯函数分布. 因此,在上述的单个网格内$[x_i, x_{i+1}]$,在中点 $x = x_{i+\frac{1}{2}}$就构成了一个间断分解问题,这就是间断分解的 Riemann 问题.

2.5 Riemann 问题的数值解方法

今天看来,一个精细和有效的偏微分方程数值方法,或者计算流体动力学

方法,实质上是求解 Riemann 和 Riemann 问题列的方法. 因为它不仅是适应于光滑的古典解,而更主要的是针对各种间断解具有大梯度、大变形解的方法. 我们首先简单地给予分类叙述.

1. 构造性的近似解方法

最具有物理或力学特征的方法是各种构造性的近似解法. 这里首先要提到的是利用特征线关系和间断关系(Rankine-Hugoniot relations)的古老的特征线激波装配法(shock-fitting-type methods,详细的讨论,可参考文献[246]). 由于方法的强非线性和迭代收敛问题的复杂性,特别是向一般情况推广的困难,极大地限制了方法的发展和应用.

其次,当代最适应、最有效的构造性方法,发展迅速,种类繁多. 其中最为重要的是 Roe 的 Riemann 问题近似解算子 (approximate solver) 方法. 1981 年 Roe 针对齐次守恒律方程组 Riemann 问题 (2.38),提出了一种线性化的求近似解的方法,作者称为 approximate Riemann solver 方法. 其基本思想,是构造守恒律方程组的流通量函数 $f(U)$的一个满足三项条件的常数矩阵 $\widetilde{A}(U_l, U_r)$,代替原来的 Jacobi 矩阵 A. 而且,原 Riemann 问题(2.38)近似地由线性化方程组

$$U_t + \widetilde{A}(U_l, U_r)U_x = 0, U = (u_1, \cdots, u_k)^{\mathrm{T}} \tag{2.42}$$

$$U(x,0) = \begin{cases} U_l, & x \leqslant 0, \\ U_r, & x > 0, \end{cases} \tag{2.43}$$

来取代. 而实际的求解方法,则利用了加权平均的参向量 (parameter vector). 例如对于流体动力学方程组采用质量加权平均,在浅水波问题方程组采用水深加权平均等.

$$\begin{aligned} w(U_r, U_r) &= \frac{(\sqrt{\rho} w)_l + (\sqrt{\rho} w)_r}{\sqrt{\rho_l} + \sqrt{\rho_r}}, \\ w(U_r, U_r) &= \frac{(\sqrt{h} w)_l + (\sqrt{h} w)_r}{\sqrt{h_l} + \sqrt{h_r}}, \end{aligned} \tag{2.44}$$

其中 w 可以代表守恒律方程组的其他未知函数,如 u, v, p, e, H 等等,而密度函数 ρ 或者水深函数h,就成了这种参向量的基本参数. 于是 $\widetilde{A}(U_l, U_r)$的特征向量、函数的变差或者跳跃量 (jump)$(U_l - U_r)$和流通量函数的变差 $f(U_l) - f(U_r)$将都按照这种参向量展开,构造性地给出了一种很有特色的求解途径. 这种思想,在今天的许多数值方法的研究和设计中常常被引用. 这种方法的详细讨论和分析将放在第四章里.

类似的 Riemann 问题近似解算子方法,有 Harten, Osher 等等所提出表达

形式.

1987 年 Ben-Artzi 又提出了称之为 Riemann 问题方法,简称 RPM. 它是一种改进的 Godunov 二阶方法,其中采用了左右线性函数初值的 Riemann 问题作为求解的出发点. 类似于 Harten 和 Osher 等人的相似解形式. 方法在各种复杂的一维激波和障碍物相互作用的数值模拟中很有成效.

在第四章里,我们将比较详细地讨论 Riemann 间断分解问题和 Riemann 问题的 Roe 算子方法.

2. 间断解捕捉法

第二类方法,是所谓的间断解捕获方法(shock-capture-type methods). 这是当代更为活跃、广泛采用的方法. 原因是它一般并不涉及间断解的间断关系,避开了复杂而困难的非线性迭代,借助方法所固有的数值耗散性效应(或者数值黏性效应),自动地捕获到所要计算的间断解结构.

当然,古典的所谓人工黏性法,以及各种数值耗散性的有限差分方法都是属于此类[181,183].

许多的所谓高分辨率方法,则是这类方法的最新发展和代表. 所以,今天我们常常提"高分辨率方法"的设计问题.

一个真正的好格式,它应当能够在数值计算和数值模拟实验中,得到原问题的逼真的、锐利的波形图像,习惯上称为具有高分辨率. 最早提出这一概念的是 Harten 等人的著名的论文[89],应当说这是 TVD 格式的开创性的工作. 所谓 TVD(total variation diminishing),就是采用自适应的数值耗散和色散的调节机理,保证总网格函数值变差减小性质. 即要求数值解满足条件

$$\mathrm{TV}(u^n) = \Delta x \sum_i \left| \Delta u_i^n \right|, \tag{2.45}$$

其中

$$\mathrm{TV}(u^{n+1}) \leqslant TV(u^n). \tag{2.46}$$

TVD 格式的一般形式为

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(\bar{f}_{i+\frac{1}{2}} - \bar{f}_{i-\frac{1}{2}}) \tag{2.47a}$$

或者

$$u_i^{n+1} = u_i^n - C_{i-1/2}(u_i^n - u_{i-1}^n) + D_{i+1/2}(u_{i+1}^n - u_i^n), \tag{2.47b}$$

其中,$\bar{f}_{i\pm\frac{1}{2}}$称为数值流向量(numerical flux)

$$\bar{f}_{i+1/2} = \bar{f}(u_{i-l}, \cdots, u_i, \cdots, u_{i+k+1}), k, l \geqslant 0, \tag{2.48}$$

它要求满足相容性条件

$$\bar{f}(u, \cdots, u, \cdots, u) = f(u). \tag{2.49}$$

对于(2.44b)形式的 TVD 格式,有下面的重要定理

Harten 引理 格式是 TVD 的一个充分条件是

$$\begin{cases} C_{i+1/2} \geqslant 0, \quad D_{i+1/2} \geqslant 0, \\ 0 \leqslant C_{i+1/2} + D_{i+1/2} \leqslant 1. \end{cases} \tag{2.50}$$

证明 重写差分方程

$$u_{i+1}^{n+1} = u_{i+1}^n - C_{i+1/2}(u_{i+1}^n - u_i^n) + D_{i+3/2}(u_{i+2}^n - u_{i+1}^n),$$

减去(2.47b)式,可得

$$u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1} = (u_{i+1}^n - u_i^n)(1 - C_{i+1/2} - D_{i+1/2}) + C_{i-1/2}(u_i^n - u_{i-1}^n) + D_{i+3/2}(u_{i+2}^n - u_{i+1}^n).$$

利用定理的给定条件,取两侧的绝对值得

$$|u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}| \leqslant |u_{i+1}^n - u_i^n| - C_{i+1/2}|u_{i+1}^n - u_i^n| - D_{i+1/2}|u_{i+1}^n - u_i^n| + C_{i-1/2}|u_i^n - u_{i-1}^n| + D_{i+3/2}|u_{i+2}^n - u_{i+1}^n|.$$

对指标 i 求和

$$\sum_i |u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}| \leqslant \sum_i \Big\{ |u_{i+1}^n - u_i^n| - C_{i+1/2}|u_{i+1}^n - u_i^n| - D_{i+1/2}|u_{i+1}^n - u_i^n| + C_{i-1/2}|u_i^n - u_{i-1}^n| + D_{i+3/2}|u_{i+2}^n - u_{i+1}^n| \Big\},$$

即得

$$\sum_i |u_{i+1}^{n+1} - u_i^{n+1}| \leqslant \sum_i |u_{i+1}^n - u_i^n|.$$

注意,此时是假定的周期或紧致边界条件. Harten 引理是证明数值格式为 TVD 的常用依据.

数值流向量的构造是否优良,直接关系到格式的精度、效用和分辨率,特别是关系到方法的自适应性. 事实上,PPM,TVD,ENO 和 WENO,以及高阶的 Godunov 格式等,都可以属于 high resolution 类方法.

那么,又是如何实现高分辨率格式的设计呢? 这就是在保证格式的相容性、稳定性的前提下,在设计和构造格式时能够尽可能减弱其数值耗散性(可是,又要避免陷于数值逆耗散性的境地!)保持数值耗散性优势. 关于这方面的内容,将在后面进行深入的讨论.

3. 具有统计模拟特点的数值方法

众所周知,Monte-Carlo 方法是一种古典的具有统计特点的近似数值方法.

格子气和格子波尔兹曼方法(lattice gas method and lattice Boltzmann method)是近十几年发展起来的,用于模拟各类物理场的一种数值模拟方

法[73,130,137]. 与从连续系统的偏微方程出发的传统数值方法相反,其根本思想是对数学物理问题重新建立离散粒子的统计模型. 利用预先规定的规则和相应的问题背景,进行流体和物理现象的数值模拟.

数值方法发展到今天,已经是姹紫千红、精彩纷呈,无论哪一类方法都有自己的特色和长处,也有其弱点和局限性. 差分方法的优点是灵活、多样、适应性强,但它在几何区域上又很受限制;有限元方法却在求解区域上灵活、逼近精度高,但在处理流体的许多复杂问题上受限制;有限体积法,特别是非结构网格的有限体积法基本上结合了有限差分方法和有限元方法的长处,实际上就是有限差分方法和有限元方法相互渗透和相互融合的产物.

现在看来,许多新型的方法常常是各种不同类型方法思想的融合或者结合和取长补短而发展、创新的结果. 例如 Chorin 提出的著名的随机选择法 (random choice method) 就是结合了特征线构造性方法、统计模拟思想的近似解方法.

另一方面,有限元方法的研究和应用也是非常活跃的,混合元、间断元、运动元和时空元方法,迎风有限元方法,谱有限元方法 (spectral FEM),控制体有限元方法 (control volume FEM),边界有限元(boundary finite methods)方法等等的有限元方法研究和应用业已取得很大成功.

我们应当尽可能地了解许多新方法、新思想,如有限体积法,谱方法,特征线方法和格子类方法等,也需要认识某些新发展,如多重网格法,区域分解法,格子气和格子 Boltzmann 法,front tracking 方法,MAC、PIC 和 volume of fluids 方法等,在实际问题的数值模拟中,兼收并蓄、融会贯通、相互渗透、开拓创新.

练习题

1. 证明 upwind leap-frog 格式(2.13)与齐次常系数单行波方程(1.1)相容.
2. 证明对于齐次常系数单行波方程(1.1),通过 Taylor 展开方法设计的 Lax-Wendroff 格式

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{c}{2}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) + \frac{c^2}{2}(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n)$$

是非单调格式.
3. 对于气体动力学方程组(1.28a)(1.28b)和拟线性形式(2.14),试求相应的 $T, A^{\pm}, |A|, F^{\pm}$. 并且设计一种迎风型格式.
4. 对于无黏的 Burgers 方程的(2.24),试求它的熵对. 即 u 的一个凸函数 $U(u)$ 和一个 u 的连续可微函数 $F(u)$.

第三章　有限差分方法的数值耗散、数值色散和数值群速度效应

通过前一章的回顾和介绍,我们已经看到,对于有限差分方法和其他数值方法的理论分析,有稳定性、收敛性、守恒性和单调性,甚至还有"迎风性",间断解的惟一性的熵增条件等. 这些理论分析问题关系到数值方法的可靠性、合理性和有效性问题,是最根本的理论课题.

可是,今天数值方法的研究和应用,已经不仅仅是方法的可靠性、合理性的问题了,而是正在向数值方法内部的、固有的、微观的性质深入着,也就是说更进一步地要求数值方法的精细、高分辨率和自适应性效果. 比如说,对于同一个微分方程,我们可以通过各种方法,设计它的许许多多的差分格式. 这些差分格式通过理论分析,有的是稳定的、可靠的,而有的是不稳定的、不合理的. 即使那些稳定的、可靠的格式,也各有不同的表现形式,其中有的表现出很强的光滑化数值效果,即呈现很强数值耗散性效应;有的则可能导致在数值解梯度大的地方产生寄生(parasitic),或者虚假(spurious)的振荡,呈现很强的数值色散性效应;特别是,有的格式计算的数值解波形,或者波包(wave-packet),还会发生位置漂移、超前移位或滞后移位(wave-shift, leading shift or lagging shift)现象,这就是现在引起重视的数值群速度效应问题. 上述所表现的差分格式的性质,已经不是稳定性、收敛性、守恒性和单调性所能够解释和处理的. 它涉及差分格式的内在微观的特征. 这就是我们在这一章讨论的数值方法的数值耗散性、数值色散性和数值群速度效应问题.

有限差分方法的稳定性和收敛性理论研究的奠基性工作属于 1928 年 Courant,Friedrichs 和 Lewy[47]. 20 世纪 40 年代和 50 年代,von Neumann 和 Richtmyer 等提出和发展了 Fourier 分析方法[181],使有限差分方法的理论分析工作得到了迅速的发展和广泛的应用. 对此我们在前一章里已经提及,想来读者也早已熟知. 60 年代的后期,Hirt[99]和 Fromm[74]等深刻地认识到,有限差分格式内在的数值耗散性和数值色散性效应的重要,分别提出了"启发性的判稳理论(heuristic stability theory)"和"减弱数值色散效应方法(method of reducing dispersion)". 前者利用差分格式的二阶数值耗散余项的正负,来判断差分格式的稳定与否;后者提出"zero average phase error" 的思想,利用不同格式的组合,减弱或者消除数值色散效应引起的寄生振荡和非线性不稳定性. 特别是 70 年代以来,Warming-Hyett 提出了 modified PDE 思想和分析稳定性的方法[238],发展了 Hirt 的思想,提出一种系统而有效方法. Vichnevtsky、Bowles[232]和 Trefethen[225]更进一步注意到差分格式的数值群速度效应问题.

从 80 年代初开始,刘儒勋[140,144,147]等人明确地提出了有限差分格式数值余项效应的课题和理论分析方法(numerical remainder-effect analysis method,简称 REAM). 利用这种途径,可以通过对有限差分格式的数值余项的分析,对格式的精度、相容性、稳定性、数值耗散性、数值色散性和数值群速度效应,统一地进行讨论. 特别是,这种方法非常具有构造性,也就是说,通过分析可以对差分格式的内在机理、特性和改进方向有所把握,从而可以进行格式的改造、改进和优化.

3.1 在数值模拟中存在的某些奇怪现象[223,246]

1. 为什么算术平均产生如此神奇的效果

考虑最简单的数值模型(1.1)的齐次形式

$$u_t + au_x = 0,\ a = \text{const} > 0. \tag{3.1}$$

众所周知,它的 FTCS (forward time and central space 逼近) 差分格式

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{c}{2}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n),c = \frac{a\Delta t}{\Delta x} \quad (\text{Courant 数}) \tag{3.2}$$

是不稳定的,但是如果将右端第一项利用算术平均替换,即得 Lax 格式

$$u_i^{n+1} = \frac{1}{2}(u_{i+1}^n + u_{i-1}^n) - \frac{c}{2}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n), \tag{3.3}$$

然而这一格式却是稳定的,不仅稳定而且是有点“稳定过头”,即呈现出很强的数值耗散性效应,或者称为光滑效果. 如图 3.1 所示.

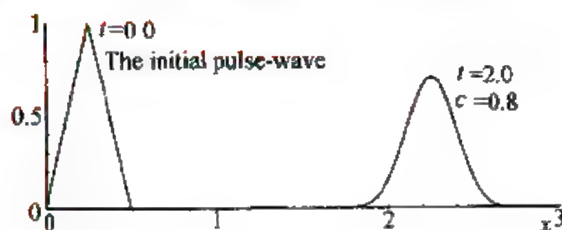


图 3.1 一个尖波初值经过 Lax 格式计算后的光滑效果

类似的例子是对于热传导方程

$$u_t = ku_{xx},\ k = \text{const} > 0 \tag{3.4}$$

有我们大家所熟悉的 Richardson 格式

$$u_i^{n+1} = u_i^{n-1} + 2\alpha(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n),\alpha = \frac{k\Delta t}{\Delta x^2}, \tag{3.5}$$

它也是不稳定的. 然而仅仅采用了一种算术平均的替换,所得到的 Duford-Frankel 格式,即

$$u_i^{n+1} = u_i^{n-1} + 2a\left(u_{i+1}^n - \left(u_i^{n+1} + u_i^{n-1}\right) + u_{i-1}^n\right),\ a = \frac{k\Delta t}{\Delta x^2} \tag{3.6}$$

却是恒稳定的格式.

2. 为什么在大梯度、人工边界、介质面和变网格界面会产生数值振荡

如果对于(3.1),给定"方波"的初值条件

$$u(x,0) = \begin{cases} 1, & 如果\ 0 \leqslant x \leqslant 1.0, \\ 0, & 如果\ x > 0, \end{cases} \tag{3.7}$$

分别采用 Lax-Wendroff

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{c}{2}\left(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n\right) + \frac{c^2}{2}\left(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n\right) \tag{3.8}$$

和 Warming-Beam 格式

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} = {} & u_i^n - \frac{c}{2}\left(3u_i^n - 4u_{i-1}^n + u_{i-2}^n\right) \\ & + \frac{c^2}{2}\left(u_i^n - 2u_{i-1}^n + u_{i-2}^n\right),当\ a > 0, \end{aligned} \tag{3.9w}$$

或者同样效果的 Moretti 的 λ 格式(见第 3.5 节)

$$\begin{aligned} \overline{u_i^{n+1}} &= u_i^n - c\left(2u_i^n - 3u_{i-1}^n + u_{i-2}^n\right), \\ \overline{\overline{u_i^{n+1}}} &= \overline{u_i^{n+1}} - c\left(\overline{u_i^{n+1}} - \overline{u_{i-1}^{n+1}}\right), \\ u_i^{n+1} &= \frac{1}{2}\left(u_i^n + \overline{\overline{u_i^{n+1}}}\right) \end{aligned} \tag{3.9m}$$

计算,其结果给出在图 3.2 中. 读者可以看到上述两种格式分别在方波的波头、波尾或者在波尾、波头产生虚假的振荡. 特别有趣的现象是两种格式所产生的振荡,很有点反对称的特征. 下面通过有限差分格式的余项效应的研究,我们将会看到,这是由它们的数值色散性余项和效应的互反性质所决定的.

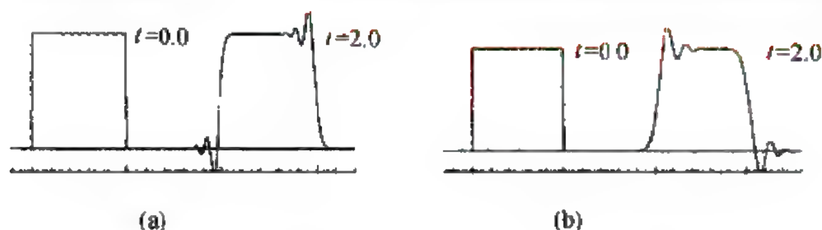


图 3.2　同样的方波初值经过 B-W 和 Moretti 格式计算

再例如在粗糙的人工边界条件、变网格界面或者在不同的介质面(即不同的方程系数)的地方,也常常产生这种寄生的高频振荡. 读者还可以在文献[225,118]中找到类似的有趣的示例.

3. 为什么数值解的波包、波前等常常发生位置的漂移或错位[225]

首先看一个简单的例子. 考察方程(3.1)的如下高频振荡波形的初值条件

$$u(x,0) = \begin{cases} e^{-16\left(x-\frac{1}{2}\right)^2}\sin\xi x, & 0 < x < 1, \\ 0, & x < 0 \text{ 或 } x > 1, \end{cases} \tag{3.10}$$

其中 $a\equiv 1, \xi = 40\pi, \Delta x = \dfrac{1}{160}, c = 0.6$. 利用蛙跳格式

$$u_i^{n+1} = u_i^{n-1} - c(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \tag{3.11}$$

进行计算. 其结果给出在图 3.3.

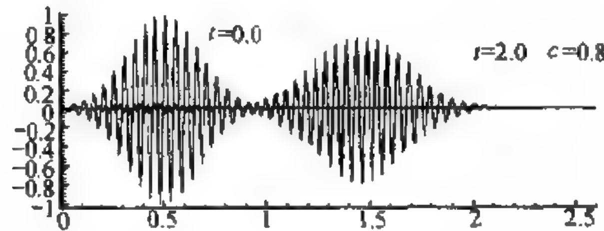


图 3.3 一个高频振荡波初值经过 L-F 格式的计算产生了波包的严重错位

事实上,这种数值解的错位现象时有发生. 早在 1965 年,Zabusky 和 Kruskal[253]通过孤立子的数值模拟试验,就已经发现了数值解的波形所产生的错位现象. 那是对于 KdV 方程和孤立子初值条件,

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = 0, u(x,0) = 2\eta^2\text{sech}^2(\eta x) \tag{3.12}$$

采用简单的系数项算术平均的差分格式

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} = u_i^{n-1} &- \frac{2\Delta t}{\Delta x}(u_{i+1}^n + u_i^n + u_{i-1}^n)(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \\ &- \frac{\Delta t}{\Delta x^3}(u_{i+2}^n - 2u_{i+1}^n + 2u_{i-1}^n - u_{i-2}^n). \end{aligned} \tag{3.13}$$

试验的结果发现,数值孤立子竟然呈现滞后现象. 尽管数十年来已经有许多学者进行了这样那样的研究和解释,其中文献[98]的解释可以说是最为合理和严格的,但是也只是说出了其所以然.

3.2　有限差分格式的 modified PDE 和格式余项效应分析方法

1. 微分方程及其解的耗散与色散

考虑常系数线性微分方程

$$u_t = L\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)u, \tag{3.14}$$

其解可用单波解的迭加来表示

$$u(x,t) = \sum_{\xi} A_\xi e^{i(\omega t+\xi x)}, \tag{3.15}$$

其中 A_ξ 为衰减因子，ω 为频数，ξ 为波数. 上式中每一个波分量都是线性方程(3.14)式的解. 不失一般性，只考虑单波解

$$u(x,t) = e^{-\alpha t}e^{i(\omega t+\xi x)} = e^{(-\alpha+i\omega)t+i\xi x}, \tag{3.16}$$

则有原微分方程的耗散关系 $\alpha_0(\xi)$，色散关系 $\omega_0(\xi)$，相速度 $\nu_p^0(\xi)$，群速度为 $\nu_g^0(\xi)$为

$$\alpha_0 = \alpha_0(\xi) = -\operatorname{Re}(L(i\xi)), \tag{3.17}$$

$$\omega_0 = \omega_0(\xi) = \operatorname{Im}(L(i\xi)), \tag{3.18}$$

$$\nu_p^0 = \nu_p^0(\xi) = \frac{\omega_0(\xi)}{\xi}, \tag{3.19}$$

$$\nu_g^0 = \nu_g^0(\xi) = \frac{d\omega_0(\xi)}{d\xi}. \tag{3.20}$$

若 $\alpha_0=0$，则称方程为纯色散型方程；若 $\omega_0=0$，则称方程为纯耗散型方程.

2. 差分格式的 modified PDE 和数值余项效应分析方法

根据 Warming 和 Hyett 的 MPDE 思想和刘儒勋的差分格式的余项效应分析方法(参见[118,140,144,146,147])，我们可以讨论差分格式的数值耗散性及数值色散性等余项效应.

对方程(3.14)，其相容的差分格式可写成

$$\sum_{\alpha} A_\alpha u_{i+\alpha}^{n+1} = \sum_{\beta} B_\beta u_{i+\beta}^{n}, \tag{3.21}$$

其中 A_α, B_β 为差分方程系数，α, β 为整数. 经过 Taylor 展开的自循环消去法，可将格式 (3.21) 转化为完全等价的修正的偏微分方程(即 modified PDE)

$$u_t = L\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)u + R_s + R_p, \tag{3.22}$$

其中

$$R_s = \sum_l \nu_{2l} \frac{\partial^{2l} u}{\partial x^{2l}}, \tag{3.22s}$$

$$R_p = \sum_m \mu_{2m+1} \frac{\partial^{2m-1} u}{\partial x^{2m+1}}, \tag{3.22p}$$

其中 R_s, R_p 分别为数值耗散余项，数值色散余项. 以单波解 $u(x,t) = e^{-\alpha t} \times e^{i(\omega t + \xi x)}$ 代入原方程，易得上面差分格式的数值耗散、数值色散、数值相速度与数值群速度，分别为

$$\alpha_N = \alpha(\xi) = \alpha_0(\xi) - \sum_l (-1)^l \nu_{2l} \xi^{2l}, \tag{3.23}$$

$$\omega_N = \omega(\xi) = \bar{\omega}_0(\xi) + \sum_m (-1)^m \mu_{2m+1} \xi^{2m+1}, \tag{3.24}$$

$$\nu_p^N = \nu_p^0 + \sum_m (-1)^m \mu_{2m+1} \xi^{2m}, \tag{3.25}$$

$$\nu_g^N = \nu_g^0 + \sum_m (-1)^m (2m+1) \mu_{2m+1} \xi^{2m}, \tag{3.26}$$

其中 α_0, ω_0, ν_g^0 分别为原微分方程的耗散关系、色散关系和群速度. 可见，差分格式引入的数值耗散主项和数值色散主项分别为

$$\Delta\nu_{\text{main}} = (-1)^{l_0+1} \nu_{2l_0} \xi^{2l_0}, \tag{3.27}$$

$$\Delta\mu_{\text{main}} = (-1)^{m_0} \mu_{2m_0+1} \xi^{2m_0+1}, \tag{3.28}$$

其中 l_0、m_0 分别为 ν_{2l} 和 μ_{2m+1} 中第一个不等于零的系数之下标.

根据 Vichnevetsky, Trefethen 和刘儒勋等的研究和分析，现将重要的结论列在下面.

[结论 1] 若差分格式的耗散主项

$$\Delta\nu_{\text{main}} = (-1)^{l_0+1} \nu_{2l_0} \xi^{2l_0} > 0, \tag{3.29}$$

则格式为 l_0 阶正耗散格式，且格式稳定；反之，则格式为 l_0 阶逆耗散格式，且格式不稳定.

[结论 2] 若差分格式的色散主项

$$\Delta\mu_{\text{main}} = (-1)^{m_0} \mu_{2m_0+1} \xi^{2m_0-1} > 0, \tag{3.30}$$

则格式为 m_0 阶正色散格式；反之，则格式为 m_0 阶逆色散格式.

[结论 3] 若

$$|\Delta\nu_{\text{main}}|^2 > 4|\Delta\mu_{\text{main}}|, \tag{3.31}$$

则格式为耗散优势格式，具有光滑效果；反之，则格式为色散优势格式，呈色散效应，有高频振荡发展，可能产生非线性计算不稳定性.

［结论 4］ 数值解的波前(wave-front)、波包(wave-packet)和波能(wave-energy)将以格式的数值群速度传播. 换句话说,数值解的波形、波包、波前和波能将产生错位现象. 如果 $\Delta\nu_g>0$,将产生超前错位(leading-shift);反之,发生滞后错位(lagging shift).

3.3 数值模拟中所发生的奇怪现象的解释

现在,我们可以利用有限差分格式的余项效应分析方法,来回答 3.1 中的问题.

1. 算术平均的数值耗散性效应

众所周知,模型方程(3.1)的 Lax 格式(3.3)是由下面的差分离散逼近得到的

$$\frac{u_i^{n+1}-\frac{1}{2}(u_{i+1}^n+u_{i-1}^n)}{\Delta t}+a\frac{u_{i+1}^n-u_{i-1}^n}{2\Delta x}=0. \tag{3.32}$$

而 FTCS 格式则是

$$\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t}+a\frac{u_{i+1}^n-u_{i-1}^n}{2\Delta x}=0. \tag{3.33}$$

从(3.32)减去(3.33),我们就得到了 Lax 格式因为算术平均而产生的数值耗散部分

$$\Delta=\frac{1}{\Delta t}\left(\frac{1}{2}(u_{i+1}^n+u_{i-1}^n)-u_i^n\right)=\frac{\Delta x^2}{2\Delta t}(u_{xx})_i^n+\cdots.$$

另一方面,对于 FTCS 格式,利用 Taylor 展开方法和通过自循环消去方法(切记不可利用原微分方程代入,否则将得到不等价于差分格式的 modified MDE. 可以参考文献[238]和[246]),可以得到它的 modified MDE

$$(u_t+au_x)_i^n=-\frac{ac}{2}\Delta x(u_{xx})_i^n-\cdots. \tag{3.34}$$

很明显上述因为算术平均所产生的耗散性项,完全可以抵消和纠正 FTCS 格式的逆耗散性,即不稳定的因素. 可以推导出 Lax 格式的 modified PDE

$$(u_t+au_x)_i^n=\frac{a(1-c^2)}{2c}\Delta x(u_{xx})_i^n-\cdots. \tag{3.35}$$

同样的讨论,可以解答 Duford-Frankel 格式对于 Richardson 格式的改造.

2. 数值色散性和数值群速度效应导致寄生和虚假的振荡现象

白色的阳光通过三棱镜就产生了七色光,这是因为不同的波长或者波数

的波,在通过三棱镜时发生了错位,造成弥散所致.微分方程的准确解波形,事实上好似阳光,是由不同的波长或波数的子波的叠加所成.而数值解由于差分格式的数值余项的效应,或者说它的数值色散性和数值群速度效应,从而引人了额外的不同波长或波数的高频波成分.就是这些新的子波,它们遇到大梯度、大变形、介质面、人工边界和变网格界面等等,就会发生分离、错位,形成这种虚假和寄生的高频振荡干扰波.

3. 数值群速度效应和数值相速度效应引起数值解波形、波包和波前的错位

通过自循环消去法可以导出 leap-frog 格式的 modified PDE

$$u_t + au_x = -\frac{a(1-c^2)}{6}\Delta x^2 u_{xxx} - \cdots. \tag{3.36}$$

根据(3.19~3.20)和(3.25~3.26),不难得到它的数值群速度部分和数值相速度改变部分

$$\begin{aligned}\Delta\nu_g = \nu_g^N - \nu_g^0 &= a - \frac{a}{2}(1-c^2)(\xi\Delta x)^2 - \cdots - a \\ &= -\frac{a}{2}(1-c^2)(\xi\Delta x)^2 - \cdots.\end{aligned}$$

根据简单例子的数据 $a=1.0, c=0.6, \xi=40\pi, \Delta x=\frac{1}{160}$,我们数值计算得到每单位时间数值解波包和波前的滞后量,为 $\Delta\nu_g \approx -\frac{1}{2}(1-0.6^2)\left(\frac{\pi}{4}\right)^2 = -0.3948$. 从而,当 $t=2.0$ 时,总的滞后量在理论上大约是 0.78 左右. 这和数值试验的结果(如图 3.3 所示)是非常吻合的.

不仅如此,我们还可以证明有以下结果:

(1) leap-frog 格式和 Lax-Wendroff 格式有

$$\begin{aligned}&\Delta\nu_g, \Delta\nu_p < 0, \Delta\nu_g \approx 3\Delta\nu_p, \\ &\Delta\nu_g \approx -\frac{a}{2}(1-c^2)(\xi\Delta x)^2.\end{aligned} \tag{3.37}$$

(2) 迎风格式有

$$\begin{aligned}&\Delta\nu_g, \Delta\nu_p \begin{cases} <0, & c<0.5, \\ >0, & c>0.5, \end{cases} \\ &\Delta\nu_g \approx -\frac{a}{2}(1-c)(1-2c)(\xi\Delta x)^2.\end{aligned} \tag{3.38}$$

(3) Zabusky-Kruskal 格式在的 $\Delta t = \frac{1}{4}(\Delta x)^3$ 设定下,不难推证它的 modified PDE

$$u_t + 6uu_x + u_{xxx} = -\Delta x^2\left[2u_x + uu_{xxx} + \frac{1}{4}u_{xx}\right] + \cdots. \tag{3.39}$$

可以利用线性化方法，通过对右端前两个色散性项进行波谱分析，发现它的主要子波的波前和波包将产生滞后的错位；

(4) Lax-Wendroff 格式和 λ 格式（或者 Warming-Beam 格式）的 modified PDE，我们将发现它们的色散性主项都是三阶数值余项，但是它们的系数正负互反. 这就是说，它们所生成的寄生或者虚假振荡的位置，也相应地可能呈现互反特征.

3.4 有限差分格式的改造、改进和优化

1. 改造不稳定格式为稳定格式

在 3.1 中，我们已经看到不稳定的 FTCS 格式，可以通过算术平均的替换，改变格式的逆耗散性为正数值耗散性，从而达到稳定. 这种方法也能在有些情况下奏效，但是很盲目，尤其不能合理而适当地控制数值耗散性的强弱.

然而，利用我们提出的有限差分格式余项效应分析方法，可以比较容易地和适当地改造不稳定格式. 譬如就拿 FTCS 格式 (3.33) 来说，它的 modified PDE 是 (3.34)，其不稳定的根本原因，是与格式完全等价的这种"被修正了的微分方程"，具有"反扩散"，或者"逆耗散性"所致. 根据这种分析和它的 modified PDE，我们最简单的方法就是纠正它的逆耗散性，采用所谓的耗散性补偿手段，即在 FTCS 格式(3.33)的右端补加一项

$$\frac{u_i^{n+1}-u_i^n}{\Delta t}+a\frac{u_{i+1}^n-u_{i-1}^n}{2\Delta x}=\frac{ac}{2}\Delta x(u_{xx})_i^n,$$

然后，采用二阶差分逼近二阶导数项，这样所得到的差分格式正是著名的二阶 Lax-Wendroff 格式 (3.8)，写在简单形式下为

$$u_i^{n+1}=u_i^n-\frac{c}{2}(u_{i+1}^n-u_{i-1}^n)+\frac{c^2}{2}(u_{i+1}^n-2u_i^n+u_{i-1}^n). \quad (3.40)$$

其实，一般说来，所有的不稳定的"坏"格式，都可以通过引入一个二阶的"人工"的数值耗散项，进行改造，或者纠正.

一种多步格式，即 MacCormack 格式

$$\begin{aligned}
&\overline{u}_i=u_i^n-c(u_i^n-u_{i-1}^n) && \overline{u}_i=u_i^n-c(u_{i+1}^n-u_i^n)\\
&\bar{\bar{u}}_i=\overline{u}_i-c(\overline{u}_{i+1}-\overline{u}_i)\ \text{或者}\ && \bar{\bar{u}}_i=\overline{u}_i-c(\overline{u}_i-\overline{u}_{i-1}),\\
&u_i^{n+1}=\frac{1}{2}(u_i^n+\bar{\bar{u}}_i) && u_i^{n+1}=\frac{1}{2}(u_i^n+\bar{\bar{u}}_i)
\end{aligned} \quad (3.41)$$

它的复合格式在这种简单的模型方程情况，完全等同于前面的 Lax-Wendroff 格式. 可以看到，格式中的前两步是利用了 upwind 和 downwind 的相互补偿效果.

早在20世纪50～60年代，von Neumann 和 Richtmyer 等人采用的所谓的人工黏性法，它的基本原理实质上也就是进行数值耗散性的人为调节，不同的是那时的出发点基于物理的分析和背景.

2. 某些重要格式的改进和优化

不仅如此，即使已经稳定的格式，如果认为它的数值耗散性，或者数值色散性不适应自己问题的要求，也可以进行格式的耗散和色散的效应改造，这就是差分格式的余项补偿方法.

采用 Lax-Wendroff 格式计算高频振荡问题(3.1)+(3.10). 可以看到这种高频振荡波形在 T=2.0 单位时，几乎已经完全消失殆尽，其波包的最大幅度小于0.04!

显然，这是由于格式的数值耗散性效果，对于这种高频振荡问题来说仍然太强了. 从而就应当进一步减弱它的数值耗散性余项的强度. 不难导出 Lax-Wendroff 格式的 MPDE

$$u_t + au_x = -\frac{a(1-c^2)}{6}\Delta x^2 u_{xxx} - \frac{ac(1-c^2)}{8}\Delta x^3 u_{xxxx}\cdots. \quad (3.42)$$

于是，我们可以在原格式 (3.41) 的右端，补偿(3.42)右端的第二项，即

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{c}{2}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) + \frac{c^2}{2}(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) + \frac{ac(1-c^2)}{8}\Delta x^3 (u_{xxxx})_i^n \cdot \Delta t,$$

并进行对它的差分逼近，最终得到改进的 Ms-LW 格式

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{c}{2}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) + \frac{c^2}{2}(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) + \frac{c^2(1-c^2)}{8}(u_{i+2}^n - 4u_{i+1}^n + 6u_i^n - 4u_{i-1}^n + u_{i-2}^n). \quad (3.43)$$

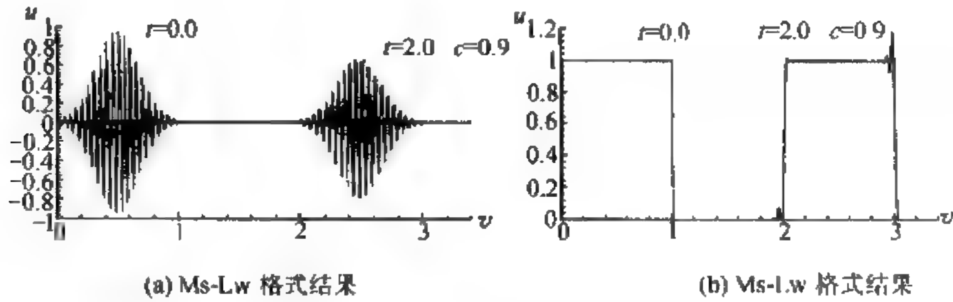
如果为了消除计算方波所产生的波头和波尾的寄生振荡，我们反而应当补偿原格式的右端第一项的色散性余项，得到 Mp-LW 格式

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{c}{2}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) + \frac{c^2}{2}(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n) + \frac{c(1-c^2)}{12}(u_{i+2}^n - 2u_{i+1}^n + 2u_{i-1}^n - u_{i-2}^n). \quad (3.44)$$

图3.4(a)(b) 给出了相应的计算结果. 可以看到已经产生了本质的改进.

格式的改造还可以利用节点模板的方式进行，同时利用余项进行参数的合理选择，达到提高精度、实现 upwind 和数值耗散、色散效应的改造.

考虑 leap-frog 格式



(a) Ms-Lw 格式结果 (b) Ms-Lw 格式结果

图 3.4 Lax-Wendroff 格式的余项补偿改造

$$u_i^{n+1} = u_i^{n-1} - c(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) \tag{2.9}$$

格式是完全二阶精度的，而且不存在数值耗散，因而在计算许多非线性波问题，甚至对于高频振荡波的计算时，其数值解幅度的衰减是比较微弱的．但是，正如前面的讨论所见到的，其数值群速度引起的波包的错位和漂移，可以导致解的完全失真．Philip Roe[167]利用了迎风思想进行改造．即选择了新的迎风性的节点模板(参见第二章的图 2.2)，采用时间的如下差分逼近，而空间的迎风逼近

$$\frac{\frac{1}{2}[(u_i^{n+1} - u_i^n) + (u_{i-1}^n - u_{i-1}^{n-1})]}{\Delta t} + a\frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x} = 0 \tag{3.45}$$

得到迎风型的 L-F 格式，记为 ULS-1

$$u_i^{n+1} = u_{i-1}^{n-1} - (1-2c)(u_i^n - u_{i-1}^n), \tag{3.46}$$

其 modified PDE 为

$$R_s \equiv 0,\ R_p = \frac{a\Delta x^2}{12}(2c-1)(c-1)u_{xxx} + \cdots, \tag{3.47}$$

可见它仍然保持了原来 leap-frog 格式的优点，同时有迎风格式的特点，更重要的是大大减弱了数值群速度的不良影响．

更进一步，我们可以考虑在上述格式的基础上改造空间的差分逼近形式．例如采用图 2.2 (b)的模板，取 3 个空间差分的加权平均

$$\frac{\frac{1}{2}[(u_i^{n+1} - u_i^n) + (u_{i-1}^n - u_{i-1}^{n-1})]}{\Delta t}$$

$$+ a\frac{\frac{1-m}{2}(u_{i+1}^n - u_i^n) + m(u_i^n - u_{i-1}^n) + \frac{1-m}{2}(u_{i-1}^n - u_{i-2}^n)}{\Delta x} = 0, \tag{3.48}$$

其中 m 为加权的待定参数．经整理得

$$R_s \equiv 0,$$

$$R_p = \frac{a\Delta x^2}{12}(-5-3c+2c^2+6m)u_{xxx} + \frac{a\Delta x^4}{240}(c-1)(-2-47c-27c^2+18c^3+60m)u_{5x}+\cdots. \quad (3.49)$$

由此可见如果选择参数

$$m = \frac{1}{6}(5+3c-2c^2) \quad (3.50)$$

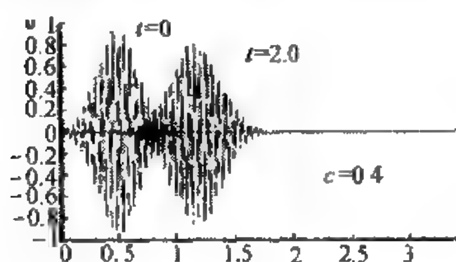
将消去 modified PDE 的三阶空间导数项，得到 5 阶的色散余项，从而使群速度效应更为减弱．如此，得到 4 阶的 ULS-2 格式

$$u_i^{n+1} = u_{i-1}^{n-1} + \frac{1}{2}(c+1)(c-2)(2c-1)(u_i^n - u_{i-1}^n) - \frac{c}{6}(2c-1)(c-1)(u_{i+1}^n - u_{i-2}^n). \quad (3.51)$$

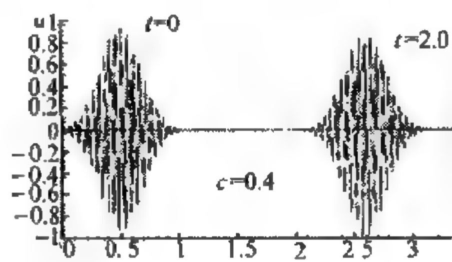
不仅空间导数可以如此进行加权，时间导数同样可以加权改造，得到相同逼近精度的另一种迎风 L-F 格式，记为 ULS-3

$$u_i^{n+1} = u_{i-1}^{n-1} + 2(1-3c)(u_i^n - u_{i-1}^{n-1}) + \frac{(1-3c)(1-2c)}{1+c}(u_{i-1}^n - u_i^{n-1}). \quad (3.52)$$

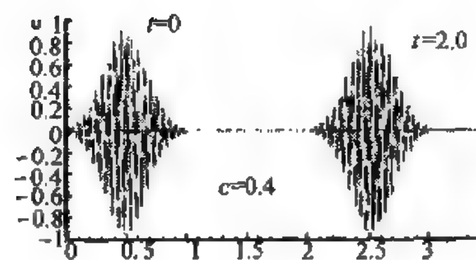
上述三种迎风 L-F 格式的数值计算效果可由图 3.5 看到，后面两种格式的保真程度和精度尤其令人惊奇．



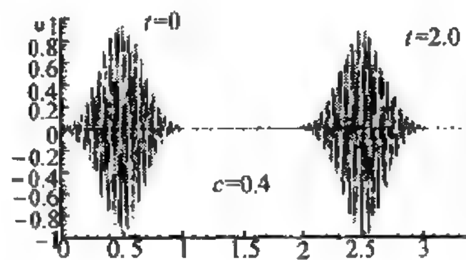
(a) L-F 格式产生大错位



(b) ULS-1



(c) UL-2



(d) ULS-3

图 3.5 四种不同的 leap-frog 格式的计算效果

图 3.5 是当 $a = 1, \xi = 40\pi, \Delta x = 1/160, c = 0.4, t = 2$ 的具体参数选定下,进行计算的结果. 由图 3.4 可以看出,三种迎风 L-F 格式的群速度引起的波包的错位情况,已经基本得到抑制. 而且表 3.1 给出了三种格式的数值耗散和色散余项.

表 3.1 三种迎风 L-F 格式的数值耗散和色散余项

格式	R_s	R_p	ϵ_p	ϵ_g
ULS-1	0	$\frac{a\Delta x^2}{12}(2c-1)(c-1)u_{xxx}$	$\frac{a}{12}(2c-1)(c-1)(\xi\Delta x)^2$	$3\epsilon_p$
ULS-2	0	$\frac{a\Delta x^4}{240}(c-2)(c-1)(2c-1)(c+1)u_{5x}$	$\frac{a}{240}(c-2)(c-1)(2c-1)(c+1)(\xi\Delta x)^4$	$5\epsilon_p$
ULS-3	0	$\frac{a\Delta x^4}{720}(c^2-1)(2c-1)(3c-1)u_{5x}$	$\frac{a}{720}(c^2-1)(2c-1)(3c-1)(\xi\Delta x)^4$	$5\epsilon_p$

利用它可以从理论上得到它们的数值群速度,分别为

$$\text{ULS-1}: \nu_g^{\text{uls-1}} \approx a - \epsilon_g = 1 + 0.046 = 1.046.$$

$$\text{ULS-2}: \nu_g^{\text{uls-2}} \approx a - \epsilon_g = 1 - 0.034 = 0.966.$$

$$\text{ULS-3}: \nu_g^{\text{uls-3}} \approx a - \epsilon_g = 1 + 0.0006 = 1.0006.$$

而原来的 L-F 格式为

$$\text{leap-frog}: \nu_g^{\text{l-f}} \approx a - \epsilon_g = 1 - 0.663 = 0.337.$$

因为振荡波包的中心是以群速度传播的,开始在 0.5 处,在 $t = 2.0$ 时的波包准确解理应在 $x_{\text{exact}} = 0.5 + 2.0 \times a = 2.5$. L-F 格式计算出的波包中心在 $x_{\text{l-f}} = 0.5 + 2.0 \times \nu_g^{\text{l-f}} = 1.174$,而改造的三种格式分别在 $x_{\text{uls-1}} = 2.592$, $x_{\text{uls-2}} = 2.432$, $x_{\text{uls-3}} = 2.5012$.

3. 对某些格式进行理论分析和检测

Moretti 的 λ 格式是 1978 年提出的一种类似于 MacCormack 型的多步格式[246]. 这种格式是利用控制微分方程的特征化形式,采用迎风型的预估-校正离散化得到的二阶差分方法. 例如当控制方程已经写在特征化形式时,即

$$u_t + (f(u))_x = h \rightarrow u_t + \lambda u_x = h. \tag{3.53}$$

一般地

$$u_t + (f(u))_x = h \rightarrow w \cdot (u_t + \Lambda \cdot u_x) = w \cdot h, \tag{3.54}$$

其中 λ 和 Λ 分别是流向量函数 $f(u)$ 的特征值,或特征矩阵,而 w 为其左特征向量. 我们可以将 λ 格式写作

$$\overline{u}_i = u_i^n - \Delta t \lambda (u_x)_{(x_i, t_n)},$$

$$\bar{u}_i = \overline{u}_i - \Delta t \lambda (\overline{u}_x)_{(x_i, t_n)},$$

$$u_i^{n+1} = \frac{1}{2}(u_i^n + \tilde{u}_i), \tag{3.55}$$

其中

$$(u_x)_{(x_i,t_n)} = \begin{cases} \dfrac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x}, & \lambda < 0, \\ \dfrac{2u_i^n - 3u_{i-1}^n + u_{i-2}^n}{\Delta x}, & \lambda > 0, \end{cases} \tag{3.56a}$$

及

$$(\overline{u}_x)_{(x_i,t_n)} = \begin{cases} \dfrac{-2\overline{u}_{i+2} + 3\overline{u}_{i+1} - \overline{u}_i}{\Delta x}, & \lambda < 0, \\ \dfrac{\overline{u}_i - \overline{u}_{i-1}}{\Delta x}, & \lambda > 0, \end{cases} \tag{3.56b}$$

格式的最后一式,采用了类似于 MacCormack 的算术平均步.

这种方法长期以来很受推崇,也有许多十分成功的应用. 但是,在应用中总是产生这样或那样的寄生振荡,造成非线性计算的不稳定性. 其实,这是因为格式是一个非单调、非迎风和非守恒的格式.

就简单的模型方程(3.1)而言,格式相应为

$$\begin{aligned} \overline{u}_i &= u_i^n - c(2u_i^n - 3u_{i-1}^n + u_{i-2}^n), \\ \tilde{u}_i &= \overline{u}_i - c(\overline{u}_i - \overline{u}_{i-1}), \\ u_i^{n+1} &= \frac{1}{2}(u_i^n + \tilde{u}_i), \end{aligned} \tag{3.57a}$$

如果消去中间量 $\overline{u}_i, \tilde{u}_i$,我们可以得到它的等价的复合格式

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} = \frac{1}{2}[&(2 - 3c + 2c^2)u_i^n + (4c - 5c^2)u_{i-1}^n \\ &+ (-c + 4c^2)u_{i-2}^n - c^2 u_{i-3}^n]. \end{aligned} \tag{3.57b}$$

可见即使当 Courant 数满足很强的约束条件 $\frac{1}{4} < c < \frac{4}{5}$,它仍然是非单调的. 而且我们可以求出其 modified PDE

$$\left(u_t + au_x = \frac{a(2+c^2)}{6}\Delta x^2 u_{xxx} - \frac{a\Delta x^3}{8}(2 + c - c^3)u_{xxxx} + \cdots\right)_{(x_i,t_n)}.$$

与 Lax-Wendroff 格式的 modified PDE 比较,它的色散项系数始终为正.

读者可能已经想到,是否如果交替采用 λ 格式和 L-W(或者 Mac Cormack) 格式,就可以达到更好的数值计算效果呢? 这是确确实实的. 这样,读者已经得到了一种改进的计算格式.

4. 有限差分格式的构造性设计

作为简单的例子,我们考虑设计最简单的模型方程 (3.1) 的一种三点显

式格式

$$u_i^{n+1} = a_1 u_{i+1}^n + a_0 u_i^n + a_{-1} u_{i-1}^n. \tag{3.58}$$

利用在网格点(x_i, t_n)的 Taylor 展开,上述待定的差分格式可得

$$\left(1 + \Delta t \partial_t + \frac{\Delta t^2}{2!}\partial_t^2 + \cdots\right)u_i^n = \Big[(a_1 + a_0 + a_{-1}) + \Delta x(a_1 - a_{-1})\partial_x + \frac{\Delta x^2}{2!}(a_1 + a_{-1})\partial_x^2 + \frac{\Delta x^3}{3!}(a_1 - a_{-1})\partial_x^3 + \cdots\Big]u_i^n,$$

或者重写为

$$\Big\{[1 - (a_1 + a_0 + a_{-1})] + \Delta t\partial_t - \Delta x(a_1 - a_{-1})\partial_x + \frac{\Delta t^2}{2!}\partial_t^2 - \frac{\Delta x^2}{2!}(a_1 + a_{-1})\partial_x^2 - \frac{\Delta x^3}{3!}(a_1 - a_{-1})\partial_x^3 + \cdots\Big\}u_i^n = 0.$$

根据差分格式应当与原微分方程的相容性,上式必须要求

$$a_1 + a_0 + a_{-1} = 1, \qquad a_1 - a_{-1} = -c. \tag{3.59}$$

如果引入参数$\alpha = 2a_1 + c$,则满足上述条件下的展开可以写成

$$\Big\{\partial_t + a\partial_x + \frac{\Delta t}{2}\partial_t^2 - \frac{a\alpha\Delta x}{2c}\partial_x^2 + \frac{\Delta t^2}{3!}\partial_t^3 + \frac{a\Delta x^2}{3!}\partial_x^3 + \frac{\Delta t^3}{4!}\partial_t^4 - \frac{a\alpha\Delta x^3}{4!c}\partial_x^4\cdots\Big\}u_i^n = 0.$$

在此基础上,利用自循环消去二阶以上时间导数项,同样可以求出它的 modified PDE

$$\begin{aligned} u_t + au_x &= R_s + R_p, \\ R_p &= \frac{a\Delta x^2}{12}(6\alpha - 4c^2 - 2)u_{xxx} + \cdots, \\ R_s &= \frac{a\Delta x}{2c}(\alpha - c^2)u_{xx} \\ &\quad - \frac{a\Delta x^3}{24c}[6c^4 + 4c^2 + 3\alpha^2 - (12c^2 + 1)\alpha]u_{xxxx} + \cdots, \end{aligned} \tag{3.60}$$

根据格式余项效应分析方法 (REAM),从上面的 modified PDE 形式可以得到许多结果:

如果差分格式的三个待定系数满足条件

$$\nu_2 = \frac{a\Delta x}{2c}(\alpha - c^2) > 0 \tag{3.61a}$$

或者

$$\begin{aligned} \nu_2 &= 0, \\ \nu_4 &= -\frac{a\Delta x^3}{24c}[6c^4 + 4c^2 + 3\alpha^2 - (12c^2 + 1)\alpha] < 0, \end{aligned} \tag{3.61b}$$

则格式是二阶的、正耗散性的、稳定的. 换句话说,正耗散性、稳定性条件为

$$a_1 > \frac{c(c-1)}{2}, \text{或者 } a_1 = 0, \ c < 1,$$

而且仅当 $a_1>0, c\leqslant 1$,格式是稳定而且单调的.

显然地,利用上述 modified PDE 形式,我们也可以很简单地推导出大家已经讨论过的诸多差分格式,例如

upwind: $a_1 = 0, \nu_2 = \frac{a}{2}(1-c)\Delta x, \mu_3 = -\frac{1}{6}a(1-c)(1-2c)\Delta x^2$.

Lax: $a_1 = \frac{1-c}{2}, \nu_2 = \frac{a}{2c}(1-c)\Delta x, \mu_3 = \frac{1}{3}a(1-c^2)\Delta x^2$.

FTCS: $a_1 = -\frac{c}{2}, \nu_2 = -\frac{1}{2}ac\Delta x, \mu_3 = -\frac{1}{6}a(1+2c^2)\Delta x^2$.

L-W: $a_1 = \frac{c(c-1)}{2}, \nu_2 = 0, \mu_3 = -\frac{1}{6}a(1-c^2)\Delta x^2, \nu_4 = -\frac{ac}{8}(1-c^2)\Delta x^3$.

可见 Lax-Wendroff 格式是非单调的.

3.5 差分格式的 modified PDE 的推导软件

王进和刘儒勋提出了几种不同的推导差分格式的 modified PDE 的 mathematics 程序,也成功地应用于各种差分格式的分析. 并且对于一般情况,二维和方程组的格式也提出了实施方案. 作为附录列在本书的最后.

我们通过本章的讨论,读者已经可以看到有限差分格式余项效应分析方法的功效. 不仅仅是上面已经介绍的多个方面的应用,就是对于以往的许多理论和方法问题,诸如数值滤波方法、人工黏性法,反扩散方法,等等,都可以利用这种分析方法作出理论的解释和进一步研究. 尤其重要的是,在实际的计算和数值模拟的实践中,我们可以根据余项效应,即数值耗散性、数值色散性和数值群速度效应的思想,适时地和有针对性地做出调节和合理的处理. 另外,认识了差分格式的数值余项效用和它的作用机理,也使我们对于一些高分辨率格式的构造和分析有了进一步的理解和把握. 譬如,对于限制函数(limiter),MUSCL、PPM 和 ENO 方法的设计思想,消除虚假振荡,等等,其实质是自适应调节数值耗散和色散效用.

练习题

1. 试利用格式的 Taylor 展开和自循环消去法求 Lax, leap-frog, Lax-Wendroff 和 upwind 格式的 modified PDE.
2. 证明结论(3.37)和(3.38).
3. 推导(3.48).
4. 试改造 Lax-Wendroff 格式,如何达到单调?

二、间断解问题篇

在这一篇里,我们将介绍一系列间断解或者弱解的数值模拟方法。当然,有的方法已经产生的时间也不算短了,但是其全新的活力和应用,仍然有重大的意义.

早在1965年就由Glimm提出的Riemann问题和方法,经过许多数值数学家和计算流体力学家的开拓和发展,已经呈现一派生气勃勃的景象. 如Roe参向量的Riemann解算子方法,Van Leer, Collela利用网格积分平均和重构思想,分别构造的MUSCL方法和PPM方法. 这种Riemann问题、积分平均和重构思想是具有重大的理论意义的. 也是而后Harten, Osher和舒其望等人的high resolution methods (TVD, TVB, ENO, weighted ENO等等)的重要历史铺垫.

在这一篇里,我们首先详细地讲述上述提及的几种思想和理论,而将ENO, weighted ENO等方法专门作为一章,进行特别的讨论.

第四章　间断分解和Riemann问题的特征表示

第二章里,我们已经了解Riemann问题和Riemann问题列,以及有关的简单的数学概念. 在这一章里,我们将比较详细地从力学上引入Riemann问题,介绍必要的有关概念,讨论Riemann问题的某些重要的、近似的构造性解法,特别是Roe的解算子方法.

4.1　空气动力学中的间断解问题[42,246]

在流体动力学中,最简单的不定常流模型是不记黏性的一维可压流问题,或者一维气体动力学方程组

$$U_t + f(U)_x = 0, \tag{4.1a}$$

其中

$$U = \begin{pmatrix} \rho \\ \rho u \end{pmatrix}, \qquad f(U) = \begin{pmatrix} \rho u \\ \rho u^2 + p \end{pmatrix}. \tag{4.1b}$$

或者

$$\begin{cases}\rho_t + u\rho_x + \rho u_x = 0, \\ u_t + uu_x + \dfrac{c^2}{\rho}\rho_x = 0,\end{cases} \qquad p = A\rho^\gamma, c^2 = \frac{\gamma p}{\rho}, \tag{4.2}$$

其中 $\gamma>1$ 为绝热指数. 重写上面的方程组为拟线性形式

$$V_t + AV_x = 0 \tag{4.3a}$$

及

$$V = \begin{pmatrix}\rho \\ u\end{pmatrix}, \qquad A = A(V) = \begin{bmatrix} u & \rho \\ \dfrac{c^2}{\rho} & u\end{bmatrix}, \tag{4.3b}$$

其中系数矩阵 A 有特征值和相应的的左特征向量

$$\lambda^{\pm} = u \pm c, w^{\pm} = \left(\pm\frac{c}{\rho}, 1\right). \tag{4.4}$$

于是我们可以得到 (4.3) 的沿特征线的特征化形式

$$C^{\pm} = (x(s), t(s)): \frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}s} = \lambda^{\pm}, \quad \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}s} = 1. \tag{4.5}$$

$$w^{\pm}\cdot(V_t + \lambda^{\pm}V_x) = 0 \quad 或 \quad w^{\pm}\cdot \mathrm{d}V|_{C^{\pm}} = 0.$$

局部地看来,可以认为未知函数向量 V 沿特征线 $C^{\pm}$ 是不变的常向量. 因而,从某种意义上,我们可以设计仅仅空间离散的常微分方程数值解方法,或者特征型的有限差分方法. 但是就总体说来,它不可能是常数. 特别是对于一般的拟线性方程组更是这样. 如果我们能够找到未知函数向量 V 的某个函数,使它沿特征线是一个常数,就称它为该方程组解向量的一个 Riemann 不变量. 对于方程组(4.4)而言,这是完全可以做到的.

1. Riemann 不变量定义

如果存在未知函数向量 V 的某个函数 $R(V)$,使得满足关系

$$A^{\mathrm{T}}\begin{pmatrix}R_\rho \\ R_u\end{pmatrix} = \lambda(A)\begin{pmatrix}R_\rho \\ R_u\end{pmatrix}, \tag{4.6}$$

则称 $R(V)$为问题的 Riemann 不变量.

对于某些简单的问题,例如一维不定常等熵流问题 (4.2),不难确定 Riemann 不变量为满足条件

$$\begin{bmatrix} u & \dfrac{c^2}{\rho} \\ \rho & u\end{bmatrix}\begin{pmatrix}R_\rho \\ R_u\end{pmatrix} = (u \pm c)\begin{pmatrix}R_\rho \\ R_u\end{pmatrix} \tag{4.7}$$

的 $R(V)$. 即

$$\begin{pmatrix}R_\rho \\ R_u\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\pm\dfrac{c}{\rho} \\ 1\end{pmatrix}, \tag{4.8}$$

从而,可以得到它的 Riemann 不变量 $R(V)$的具体形式

$$R^{\pm} = \pm \int \frac{c}{\rho}\mathrm{d}\rho + \int 1\mathrm{d}u = u \pm \int \frac{\sqrt{\gamma A \rho^{\gamma-1}}}{\rho}\mathrm{d}\rho = u \pm \frac{2}{\gamma-1}c, \quad (4.9)$$

并且有

$$R^{+}|_{C^{+}} = \text{const}, \quad R^{-}|_{C^{-}} = \text{const}. \quad (4.10)$$

当然,R^+并不一定在 C^- 特征线上也是常数,R^-也并不一定在 C^+特征线上也是常数. 如果有一个区域, 其中 R^+能够既在 C^+又在 C^-两类特征线上都为常数,根据(4.8)和 (4.9),那么在该域上未知函数 ρ, u 也必然在C^+又在 C^- 是常数. 换句话说,在这个区域上,两族特征线必然是直线.

仅仅在某些特殊的情况下,例如 Riemann 不变量为常数,或者特征线为直线的时候,我们才能得到确定性的解析解. 通常指诸如常数态(constant state flow)、简单波 (simple wave)和中心稀疏波 (central rarefaction wave)等.

常数流或常数态,是指未知函数,或者状态函数 ρ, u 为常数的流场区域. 显然,在常数流区,其两族特征线都是直线,而且可以证明该区域的边界也必然是直线.

2. 简单波(simple wave)定义

在(x,t)平面中的某个区域上,如果 Riemann 不变量 R^+或 R^-之一是常数,该流区即称为是简单波.

或者换一种等价叙述,如果两族特征线 C^+或 C^-之一为直线,进一步说来,如果 $R^+=$常数,则利用 (4.9) 式可以证明 C^-特征线为直线,表现为左行波. 这种简单波称 R^+为简单波. 反之,R^-为常数,C^+为直线,右行波,R^-为简单波.

3. 中心稀疏波(central rarefaction wave)定义

联系或连接两个常数态区的中间过渡区域称为中心稀疏波. 在中心稀疏波区,有相似解. 即未知量,或者状态量只是(x/t)的函数.

作为一个最简单的实际例子,考察在一个均匀的无限长管中的活塞运动,如图 4.1 所示. 活塞以不变的速度 U 左向运动,这将导致活塞右方静止气体中稀疏波的产生. 可以推证在稀疏波内气体的状态为

$$u = \frac{2}{\gamma+1}\left(\frac{x}{t} - c_0\right), \quad c = \frac{\gamma-1}{\gamma+1}\left(\frac{x}{t} + \frac{2}{\gamma-1}c_0\right). \quad (4.11a)$$

表明在稀疏波内有相似解

$$\frac{x}{t} = u + c. \quad (4.11b)$$

而且,读者不难得到整个流场的特征线分布,以及常数区和中心稀疏波区的 Riemann 不变量,气体状态量,特征线边界,活塞轨迹等的数学表达.

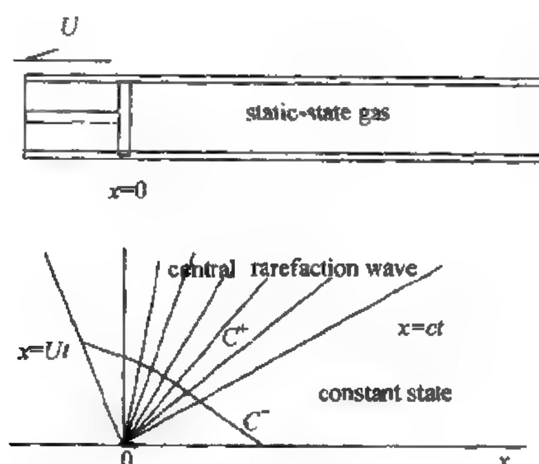


图 4.1 活塞以不变的速度 U 左向运动导致活塞右方的稀疏波

如果活塞向右做突然的推压、加速,特征线将必然相交,形成激波. 如果活塞的加速度为 a,那么形成激波的时空位置是

$$(x_s, t_s) = \left(\frac{2ac_0}{\gamma+1}, \frac{2c_0^2}{(\gamma+1)a}\right).$$

众所周知,通过间断线从左而右,流体的状态量将产生数值的跳跃(jumps),或者称为变差. 习惯上用方括弧的形式表示,即 $[f] = f_r - f_l, f = \rho, u, p$ 等等. 重要的是这种跳跃必须满足所谓的间断约束关系.

4. 间断关系(Rankine-Hugoniot relations)

在上述间断问题的情况下,如果间断线 $s = s(t)$:

$$\frac{ds(t)}{dt} = S, \quad \vec{n} = \frac{(1, -S)}{\sqrt{1+S^2}}, \tag{4.12}$$

则间断约束关系为

$$S[U] = [F(U)]. \tag{4.13}$$

对于一维流体力学的连续性方程而言,它就是

$$S(\rho_r - \rho_l) = \rho_r u_r - \rho_l u_l \tag{4.14a}$$

或者

$$\rho_r(S - u_r) = \rho_l(S - u_l). \tag{4.14b}$$

如果我们记 $Q_s = \rho_r(S - u_r) = \rho_l(S - u_l)$,一般说来我们可以将间断分为两类:

(1) $Q_s = 0$,即 $S = u_r = u_l, \rho_r \neq \rho_l$,称为接触间断;

(2) $Q_s \neq 0$,称为激波.

接触间断,种类很多,例如介质面(此时介质面法向上的速度、压力是连续的)、音速线等.

上述的讨论自然对于一般的一维守恒律是完全有效的. 但是对于二维问题,情况就比较复杂和困难了.

4.2 激波管问题的间断分解[42,223,246,156]

如果一条均匀的直管内,存在左右两个不同的常数态,被一中间薄片间隔. 在突然撤去薄片后,所发展的流场状态常常是相当复杂的. 这种物理问题我们称为激波管问题,数学上我们称为间断分解. 它正是我们所要研究的 Riemann 问题的最简单的物理背景. 一般说来,这种间断分解问题的可能发展的物理图像,是多种多样的. 但是,无论如何它的发展状态和形成的间断(激波、接触间断)或稀疏波,以及它们的运动,都应当是物理实际的,符合相应的流体力学基本定律和条件的. 在第二章里介绍的熵增条件(2.30～2.34)或者是(2.29)的极限解释,就是很重要的保证. 这也就是我们研究和求解数学上的 Riemann 问题所应当遵循的.

下面我们利用 Rankine-Hugoniot condition(4.12～4.13)和 Riemann 不变量(4.6),讨论激波管 Riemann 问题,或者说激波管间断分解问题. 特别是针对 Sod、Lax 等的初值条件,讨论它们的解.

如图 4.2 所示,激波管问题可能的发展流场图像,一般可以示意地表示为左、右行波 w_l, w_r 和一个中间的接触间断线 w^*. 于是将流场划分为四个不同的区域:左右常数态 U_l, U_r 和接触间断 w^* 左右状态 U_{*l}, U_{*r}.

如果 w_l, w_r 是稀疏波,那么它们最靠近 x 轴的边界特征线的斜率就分别是 $s_l=\min(u_l-c_l, u_l+c_l), s_r=\min(u_r-c_r, u_r+c_r)$. 如果是激波则应当根据间断关系确定. 在下面 4.3 节中也将有所讨论.

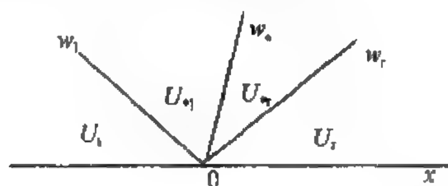


图 4.2 激波管问题的间断分解

求激波管问题的解,关键是求接触间断的左右状态

$$U_{*l}=(\rho_{*l}, u_{*l}, p_{*l}),\quad U_{*r}=(\rho_{*r}, u_{*r}, p_{*r}),\tag{4.15}$$

一般可以利用间断关系和 Riemann 不变量,通过迭代方法求得比较准确的近似. 为此,我们仅以右行波 w_r 两侧为例进行讨论.

如果 $p_{*r}>p_r$,则 w_r 为激波,由 Rankine-Hugoniot 条件

$$S(\rho_r - \rho_{*r}) = \rho_r u_r - \rho_{*r} u_{*r},$$
$$S(\rho_r u_r - \rho_{*r} u_{*r}) = \rho_r u_r^2 + p_r - \rho_{*r} u_{*r}{}^2 - p_{*r}, \tag{4.16}$$
$$S(E_r - E_{*r}) = u_r(E_r + p_r) - u_{*r}(E_{*r} + p_{*r}),$$

和状态方程

$$E = \frac{p}{\gamma - 1} + \frac{1}{2}\rho u^2,$$

可以得到

$$\frac{p_{*r} - p_r}{u_{*r} - u_r} = (\rho_r p_r)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\gamma+1}{2}X + \frac{\gamma-1}{2}\right), \quad \frac{p_{*r}}{p_r}. \tag{4.17rs}$$

如果 $p_{*r} < p_r$,则 w_r 为中心稀疏波,由 Riemann 不变量

$$R^- = u - \frac{2}{\gamma - 1}c = \text{const}, \ c = \sqrt{\gamma p/\rho}$$

也可以得到

$$\frac{p_{*r} - p_r}{u_{*r} - u_r} = (\rho_r p_r)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{\gamma-1}{2\gamma^{\frac{1}{2}}}\frac{1-X}{1-X^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}}}\right), X = \frac{p_{*r}}{p_r}. \tag{4.17rc}$$

同样地,也有左行波的 w_l 两侧的类似公式(4.17ls)和(4.17lc).

引入辅助变量 M_r,并将上式改写为

$$M_r = \frac{p_{*r} - p_r}{u_{*r} - u_r} = (\rho_r p_r)^{\frac{1}{2}}\phi(X), X = \frac{p_{*r}}{p_r},$$

$$\phi(X) = \begin{cases} \left[\frac{\gamma+1}{2}X + \frac{\gamma-1}{2}\right]^{\frac{1}{2}}, & X \geqslant 1, \\ \frac{\gamma-1}{2\gamma^{\frac{1}{2}}} \cdot \frac{1-X}{1-X^{\frac{\gamma-1}{2\gamma}}}, & X > 1, \end{cases} \tag{4.18}$$

类似地也有左侧的(4.17l).

同时,我们可以导出公式

$$u_* = \frac{p_l - p_r + M_l u_l + M_r u_r}{M_l + M_r},$$
$$p_* = \frac{u_l - u_r + M_l^{-1} u_l + M_r^{-1} u_r}{M_l^{-1} + M_r^{-1}}, \tag{4.19}$$
$$\rho_{*r} = \rho_r\left(\frac{p_*}{p_r}\right)^{\frac{1}{\gamma}}, \quad \rho_{*l} = \rho_l\left(\frac{p_*}{p_l}\right)^{\frac{1}{\gamma}},$$

利用上述的公式(4.18)和(4.19),我们可以得到一种迭代方案,计算接触间断两侧的状态.

1. 取迭代初值

$$p_*^{(0)}=\frac{1}{2}(p_l+p_r).$$

2. 利用公式(4.18)和(4.19)计算

$$M_r^{(n+1)}, M_r^{(n+1)}, \tilde{p}_*^{(n+1)}, p_*^{(n+1)} = \max(\epsilon_p, \tilde{p}_*^{(n+1)}).$$

3. 如果

$$\max(|M_r^{(n+1)}-M_r^{(n)}|, |M_l^{(n-1)}-M_l^{(n)}|)<\epsilon_M,$$

则迭代终止. 最后结果即取

$$M_r = M_r^{(n+1)},\quad M_l = M_l^{(n+1)},\quad p_* = p_*^{(n+1)}.$$

同时由(4.19)的第三式计算 ρ_{*r}, ρ_{*l} 以及利用激波关系计算可能的左或右的激波速度.

利用上述的迭代方法,例如对于 Sod 的激波管问题可得

$p_*=0.30313$,　$u_*=0.92745$,　$\rho_{*l}=0.42632$,　$\rho_{*r}=0.26557$.

此外,对于浅水波问题的 Riemann 间断分解,也有类似的迭代方案,可以查阅 Marshall 的论文.

4.3　Riemann 间断解的特征构造方法[246]

1. 一个简单的 Riemann 间断解问题模型

考虑无黏 Burgers 方程的 Riemann 间断分解问题

$$u_t+\left(\frac{u^2}{2}\right)_x=0, \text{或 } u_t+uu_x=0, \tag{4.20a}$$

$$u(x,0)=u_0(x)=\begin{cases} u_l, & x<0, \\ u_r, & x\geqslant 0, \end{cases} \tag{4.20b}$$

或者写在沿特征线上的常微分方程形式,简称特征化形式

$$C:\frac{dx}{dt}=u,\quad du|_C=0, \tag{4.21}$$

这里仅仅考察左右为常数状态的最简单情况. 其中排除平凡情况 $u_l=u_r$. 不失一般性,可以分为两种特殊情况讨论:

(a) $u_l=1>u_r=0$ 激波结构 (shock configuration).

根据特征线的分析,这时 $x=0$ 两侧的特征线必然相交,形成激波. 如图 4.3 所示. 可以看到由激波两侧出来的特征线,确确实实是向下交于初值线. 符合前面提到的熵增条件,同时也可以想像在差分网格中,才有 TVD 的特征. 而且,根据间断关系,激波的速度,即斜率为

$$D=\frac{[f(u)]}{[u]}=\left(\frac{(u_r)^2}{2}-\frac{(u_l)^2}{2}\right)\Big/(u_r-u_l)=\frac{1}{2}(u_r+u_l).\tag{4.22a}$$

对于我们的特例,其激波速度为 $D=0.5$.

$$u(x,t)=\begin{cases}u_l, & x<Dt,\\ u_r, & x\geqslant Dt,\end{cases}\tag{4.22b}$$

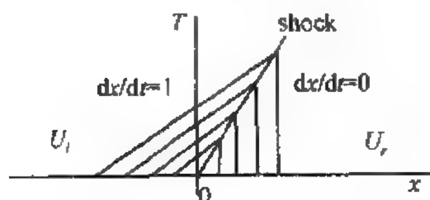
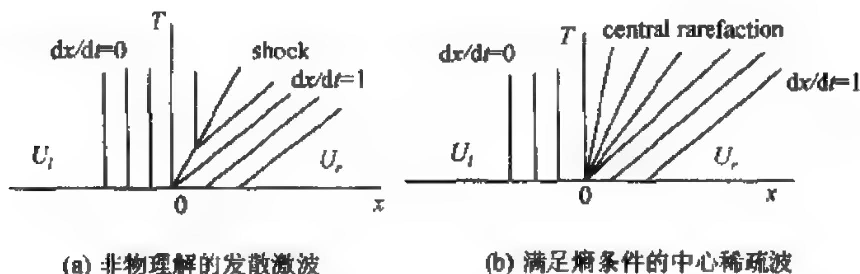


图 4.3 同族特征线相交－激波结构

由于激波将流场分为两部分,左侧为左常数态,右侧为右常数态,从而在这种激波结构情况下,我们可以得到 Riemann 问题的间断解

(b)当 $u_l=0\leqslant u_r=1$ 时的中心稀疏波结构.

根据特征线的分析,左右两侧的特征线向左右分离. 从数学上看来,是产生了中间的未定解的扇形区域. 换句话说,在数学上它不惟一. 既可以是所谓的"发散"激波形式的解,又可以是中心稀疏波解(central rarefction wave configuration). 如图 4.4(a)(b) 所示. 这种发散激波是不满足熵增条件的,不是物理解,从而应当排除. 这样我们就保证了解的惟一性.



(a) 非物理解的发散激波　　(b) 满足熵条件的中心稀疏波

图 4.4 中心稀疏波结构

根据中心稀疏波的扇形结构,首先应当计算它的左右直线边界

$$x_l=u_lt,\quad x_r=u_rt,\tag{4.23a}$$

并且根据点(x,t)所在中心稀疏波的左侧、内部或右侧的三种不同情况,间断解为

$$u(x,t)=\begin{cases}u_1, & x<x_l,\\ \dfrac{x}{t}, & x_l\leqslant x<x_r,\\ u_r, & x\geqslant x_r,\end{cases}\tag{4.23b}$$

这里应当注意:(1)如果要提高这种数值解方法的精度,就应当将激波或者中心稀疏波的左右状态,进行更加细致的刻画;(2)在中心稀疏波内,可以不利用相似解形式,而采用左右状态的线性插值方法给出

$$u(x,t)=\alpha u_l+(1-\alpha)u_r,\quad \alpha=\frac{x-x_r}{x_l-x_r}.\tag{4.24}$$

2. 一般的 Riemann 问题和特征线差分解法

1965 年 Glimm 从数学上首先提出 Riemann 问题的概念和基本理论. 在第二章里我们已经提及这种思想和概念对于数值方法,特别是间断解方法的研究所具有的意义. 根据前面的简单例子,我们可以对于比较一般的 Riemann 问题,提出一种局部的、近似的、构造性的特征差分解法.

考虑一般的 Riemann 问题列

$$U_t+A(U)U_x=0,\quad x_i\leqslant x\leqslant x_{i+1},\quad t_n<t\leqslant t_{n+\frac{1}{2}},\tag{4.25a}$$

$$U(x,t_n)=U_n(x)=\begin{cases}U_i^n, & x_i\leqslant x<x_{i+\frac{1}{2}},\\ U_{i+1}^n, & x_{i+\frac{1}{2}}\leqslant x\leqslant x_{i+1},\end{cases}\quad \forall i,\tag{4.25b}$$

其中

$$U=(u_1,u_2,\cdots,u_m)^{\mathrm T},$$
$$f(U)=(f_1(U),f_2(U),\cdots,f_m(U))^{\mathrm T},\tag{4.25c}$$

引入标准化变换

$$\xi\leftarrow x-x_i,\quad \tau\leftarrow t-t_n,\tag{4.26a}$$
$$U_l\leftarrow U_i^n,\quad U_r\leftarrow U_{i+1}^n.\tag{4.26b}$$

于是上述 RP 可以重写为

$$V_t+A(V)V_x=H(V),$$
$$-\frac{1}{2}\Delta x\leqslant\xi\leqslant\frac{1}{2}\Delta x,\ 0<\tau\leqslant\frac{1}{2}\Delta t\tag{4.27a}$$

和

$$V(\xi,0)=V_0(\xi)=\begin{cases}U_l, & -\dfrac{1}{2}x\leqslant\xi<0,\\ U_r, & 0\leqslant\xi\leqslant\dfrac{1}{2}x.\end{cases}\tag{4.27b}$$

假定 Jacobi 矩阵的特征值和左特征向量为

$$\lambda_1 < \lambda_2 < \cdots < \lambda_m,$$
$$w_1, w_2, \cdots, w_m, \tag{4.28}$$

左乘特征向量,(4.27a) 可以化为所谓的特征化形式的 m 个分离的,沿不同特征线 C_k 上的方程组

$$\begin{aligned} &C_k: \frac{dx}{ds} = \lambda_k, \frac{dt}{ds} = 1. \\ &w_k \cdot (V_t + \lambda_k V_x) = w_k \cdot H(V), \ k = 1,2,\cdots,m \end{aligned} \tag{4.29}$$

或者

$$w_k \cdot \frac{dV}{dt}\Big|_{C_k} = w_k \cdot H(V), \quad k = 1,2,\cdots,m, \tag{4.30}$$

写成积分近似形式为

$$\int_{C_k} w_k \cdot dV = \int_{C_k} w_k \cdot H(V)dt, \quad k = 1,2,\cdots,m. \tag{4.31}$$

根据前面“一个简单的 Riemann 间断解问题模型”的讨论,以及分辨激波还是中心稀疏波的情况,进行装配求解的思想和步骤,可以根据(4.29~4.31)的三种不同形式,提出各种局部特征线构造性的差分方案:

(1) 特征差分方法

由(4.29)式出发,对于每一个分方程设计,例如近似的迎风 L-F 型格式或者其他的高阶格式.

(2) 间断分解型的装配方法

由(4.31)积分出发,逐一地对每一个分方程,根据同一族特征线的分布,类似于前面的简例那样,构造网格内的间断分解结构. 然后联立得到各个分方程的离散方程,构成网格上的解.

4.4 Riemann 间断分解问题的特征表示[61,223]

1. 解的特征表示

对于双曲型守恒率问题 (4.25a),对于给定的一个左右常数态的 Riemann 初值条件,它一般可以利用 Jacobi 矩阵的线性无关的特征向量线性表示

$$U_0(x) = \sum_{k=1}^{m} \alpha_k(x) w_k. \tag{4.32}$$

假设准确解表示为

$$U(x,t) = \sum_{k=1}^{m} \beta_k(x,t) w_k, \tag{4.33}$$

那么代入到原方程,得系数 β_k 的微分方程组

$$\frac{\mathrm{d}\beta_k}{\mathrm{d}t} + \lambda_k \frac{\mathrm{d}\beta_k}{\mathrm{d}x} = 0 ,$$

$$\beta_k(x,0) = \alpha_k(x) \quad k = 1,2,\cdots,m. \tag{4.34}$$

很容易得

$$\beta_k(x,t) = \alpha_k(x - \lambda_k t), \quad k - 1,2,\cdots,m. \tag{4.35}$$

从而

$$U(x,t) = \sum_{k=1}^{m} \alpha_k(x - \lambda_k t) w_k. \tag{4.36}$$

另一方面,在 Riemann 间断分解的情况下,其左、右常数态函数又分别可表示为

$$U_L = \sum_{k=1}^{m} l_k w_k, \quad U_R = \sum_{k=1}^{m} r_k w_k. \tag{4.37}$$

则根据我们前面的讨论,这时解的表达式 (4.36),将根据点(x,t)所处的位置确定,即

$$U(x,t) = \sum_{k=1}^{m} \alpha_k(x - \lambda_k t) w_k = \sum_{k=1}^{K} l_k w_k + \sum_{k=K+1}^{m} r_k w_k,$$

$$K = \{k : x - \lambda_k t < 0,\ 0 \leqslant k \leqslant m\} \tag{4.38}$$

或者

$$U\left(\frac{x}{t}\right) = U_l - \sum_{k=K+1}^{m} (l_k - r_k) w_k = U_r + \sum_{k=1}^{K} (l_k - r_k) w_k,$$

$$K = \{k : x - \lambda_k t < 0,\ 0 \leqslant k \leqslant m\} . \tag{4.39}$$

对于一般的 Riemann 问题列 (4.25),经过规范化的相对坐标变换(4.26)后,得到(4.27)式. 所要求的未知函数节点位置,都是处在间断分解点 $x = x_{i+1/2}$线上,或者说在相对坐标 $\xi=0$ 处,所以集合 K 在这种坐标下可以代之为

$$K = \{k : \lambda_k \geqslant 0,\ 0 \leqslant k \leqslant m\} .$$

于是又有

$$U(0,\tau) = \frac{1}{2}\left(U_l + U_r - \sum_{k=1}^{m} \mathrm{sign}(\lambda_k)(r_k - l_k) w_k\right). \tag{4.40}$$

再换到原坐标下,即为

$$U(x,t) = \frac{1}{2}\left(U_l + U_r - \sum_{k=1}^{m} \mathrm{sign}(\lambda_k)(r_k - l_k) w_k\right). \tag{4.41}$$

2. 流向量和数值流向量的特征表示

首先考虑守恒律方程

$$U_t + f(U)_x = 0, \quad A = \frac{\partial f(U)}{\partial U} \tag{4.42}$$

的流向量. 因为一般情况下 $f(U) = AU$,我们利用(4.41)式的结果,可以证明有下面的定理:

定理 4.1 双曲型守恒律 Riemann 问题的流向量,可以表示为

$$f_{lr} = \frac{1}{2}(f(U_l) + f(U_r) - |A|(U_r - U_l)) . \tag{4.43}$$

证明 对于 Riemann 问题列(4.25),根据(4.41)的特征表示有

$$\begin{aligned}
f(U) = AU &= \frac{1}{2}(f(U_l) + f(U_r) - \sum_{k=1}^{m}\operatorname{sign}(\lambda_k)(r_k - l_k)\lambda_k w_k) \\
&= \frac{1}{2}(f(U_l) + f(U_r) - \sum_{k=1}^{m}(r_k - l_k)|\lambda_k| w_k) \\
&= \frac{1}{2}(f(U_l) + f(U_r) - \sum_{k=1}^{m}(r_k - l_k)(\lambda_k^+ - \lambda_k^-) w_k) \\
&= \frac{1}{2}(f(U_l) + f(U_r) - \sum_{k=1}^{m}(r_k - l_k)(\lambda_k^+ w_k - \lambda_k^- w_k)) \\
&= \frac{1}{2}(f(U_l) + f(U_r) - \sum_{k=1}^{m}(r_k - l_k)(A^+ w_k - A^- w_k)) \\
&= \frac{1}{2}(f(U_l) + f(U_r) - \sum_{k=1}^{m}(r_k - l_k)|A| w_k) \\
&= \frac{1}{2}(f(U_l) + f(U_r) - |A|(U_r - U_l)) .
\end{aligned}$$

作为上述定理的一个直接的结果,我们又有

定理 4.2 在两个节点的模板情况,双曲型守恒律的 Riemann 问题(4.25)列有简单的数值流向量

$$\bar{f}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(f_i^n + f_{i+1}^n - |A_{i+1/2}|(U_{i+1}^n - U_i^n)) . \tag{4.44}$$

同样,也不难证明

定理 4.3 在 Riemann 间断分解情况下,数值流向量又可以表示为

$$\bar{f}_{i+\frac{1}{2}} = A_{i+\frac{1}{2}}^+ U_i^n + A_{i+\frac{1}{2}}^- U_{i+1}^n . \tag{4.45}$$

证明 因为 (4.37)以及第二章的结果

$$A = A^+ + A^-, |A| = A = A^+ - A^-,$$

我们有

$$f(U_{i+\frac{1}{2}}) = \frac{1}{2}\{(A^+ + A^-)(U_i^n + U_{i+1}^n) - (A^+ - A^-)(U_{i+1}^n - U_i^n)\}.$$

从而

$$\tilde{f}_{i+\frac{1}{2}} = A^{+} U_i^n + A \quad U_{i+1}^n .$$

练习题

1. 试求气动力学方程组(1.28)和浅水方程组(1.38)的 Riemann 不变量.
2. 由(4.29)式出发,对于每一个分方程设计一种迎风型的差分格式,构成一种可行的求解方法,并且应用于气动力学方程组(1.28)和浅水方程组(1.38)的间断解问题.
3. 由(4.31)式出发,对于每一个分方程设计一种特征差分格式,构成一种可行的求解方法,并且应用于气动力学方程组(1.28)和浅水方程组(1.38)的间断解问题.
4. 由(4.31)式出发,对于每一个分方程设计,仿照无黏 Burgers 方程的间断分解,构成一种可行的求解方法,并且应用于气动力学方程组(1.28)和浅水方程组(1.38)的间断解问题.

第五章　Riemann 间断分解问题的 Roe 解法

在第二章里,我们已经简单地谈到 Riemann 问题的 Roe 近似解算子方法。现在,可以比较容易地进行这种方法的思想、理论的介绍和分析了.

5.1　Roe 方法的基本思想

仍然考虑 Riemann 间断分解问题(2.35)

$$U_t + f(U)_x = 0,$$

$$U(x,0) = U_0(x) = \begin{cases} U_l, & x \leqslant 0, \\ U_r, & x > 0, \end{cases}$$

$$U = (u_1, \cdots, u_k)^{\mathrm{T}},\ f(U) = (f_1(u), \cdots, f_k(u))^{\mathrm{T}},$$

其数值求解的难度,主要是因为非线性引起的间断分解的复杂性. 而其中之关键又是 Jocobi 矩阵 $A(U)$的非线性. Roe 方法的根本点就在于,利用左右函数的常数态 U_l, U_r,去构造一个合理的 $A(U)$替换矩阵 $\tilde{A}(U_l, U_r)$,将复杂的非线性问题转化为线性问题. 为此 Roe 提出了构造这种线性化近似矩阵的原则

$\tilde{A}(U_l, U_r)$要求具有"U"性质:

(1) $\tilde{A}(U_l, U_r) \to A(U)$,当 $U_l, U_r \to U$,即具有相容性;

(2) $\tilde{A}(U_l, U_r) \cdot (U_r - U_l) = f_r - f_l$,相似性;

(3) $\tilde{A}(U_l, U_r)$的特征向量 $\tilde{\omega}_k$,　$k = 1, 2, \cdots, m$ 是线性无关组.

显然,最容易想到的有如 $A\left(\frac{1}{2}(U_l + U_r)\right), \frac{1}{2}(A(U_l) + A(U_r))$等,但都不符合上述要求. Roe 的贡献就在于给出了一种可以遵循的途径:

(1) 引入一种参向量 (parameter vector) $\omega, \tilde{\omega}$,分别对应矩阵 $A, \tilde{A}(U_l, U_r)$的情况. 事实上,这种参向量只是一种过渡.

(2) 利用对间断跳跃的参向量的展开,确定 $\tilde{A}(U_l, U_r)$.

$$\left.\begin{aligned} [U] = U_r - U_l = \tilde{B}(\omega_r - \omega_l) \\ [f(U)] = f_r - f_l = \tilde{C}(\omega_r - \omega_l) \end{aligned}\right\} \Rightarrow \tilde{A}(U_l, U_r) = \tilde{C}\tilde{B}^{-1}. \tag{5.1}$$

(3) 同时,可以确定 $\tilde{A}$ 特征值和特征向量(注意:这里特征向量的习惯表示为 $\tilde{e}_k$!).

$$\tilde{\lambda}_k, \tilde{e}_k, k = 1, 2, \cdots, m. \tag{5.2}$$

(4) 未知函数跳跃量作上述特征向量表示.

$$[U] = U_r - U_l = \sum_{k=1}^{m} \tilde{a}_k \tilde{e}_k. \tag{5.3}$$

(5) 确定数值流向量的特征表示.

根据第四章的(4.43)我们有

$$f(U) = \frac{1}{2}(f(U_l) + f(U_r) - |A|(U_r - U_l)).$$

利用(5.3)式,立即可得

$$f_{lr} = \frac{1}{2}\left(f_l + f_r - \sum_{k=1}^{m} \tilde{a}_k |\tilde{\lambda}|_k \tilde{e}_k\right), \tag{5.4}$$

根据上面的结果,对于 Riemann 列的间断分解问题 (4.25),可以有不同的求解方案:

(1)其一是用线性化的方程组

$$\begin{gathered} U_t + \tilde{A}(U_i, U_{i+1})U_x = 0, \\ x_i \leqslant x \leqslant x_{i+1}, \ t_n < t \leqslant t_{n+\frac{1}{2}} \end{gathered} \tag{5.5a}$$

及

$$U(x, t_n) = U_n(x) = \begin{cases} U_i^n, & x_i \leqslant x < x_{i+\frac{1}{2}}, \\ U_{i+1}^n, & x_{i+\frac{1}{2}} \leqslant x \leqslant x_{i+1}, \end{cases} \quad \forall i \tag{5.5b}$$

代替原问题 (4.25),利用各种可行的数值方法进行求解.

(2)其二是利用数值流向量的方法

根据第四节 Riemann 列标准化的讨论和上面的(5.4)式,我们即可得到两节点数值流向量的 Roe 方法

$$U_i^{n+1} = U_i^n - r(\tilde{f}_{i+\frac{1}{2}} - \tilde{f}_{i-\frac{1}{2}}), \ r = \frac{\Delta t}{\Delta x}. \tag{5.6a}$$

根据(5.3)式,数值流向量为

$$\tilde{f}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\left(f_i + f_{i+1} - \sum_{k=1}^{m} \tilde{a}_k |\tilde{\lambda}_k| \tilde{e}_k\right). \tag{5.6b}$$

由此可见,Roe 方法的思想虽然简单,但它不仅提供了一种构造性解法,也给数值流向量型的差分方法开拓出一条新路. 事实上,许多高精度方法,高阶 Godunov 方法[166],高分辨率方法[168],以及许多高阶的 FVM[22,92],常常把 Roe 的这种思想作为方法设计中的一种重要的依据.

5.2 一维问题的 Roe 参向量和近似 Riemann 解算子

仍然考虑最简单的理想气体动力学方程组 (4.1～4.3) 的例子

$$U_t + f(U)_x = 0,$$

其中

$$U=\begin{pmatrix}\rho\\ \rho u\end{pmatrix},\quad f(U)=\begin{pmatrix}\rho u\\ \rho u^2+p\end{pmatrix}\tag{5.7a}$$

或

$$U_t+A(U)U_x=0,\quad A(U)=\begin{pmatrix}0 & 1\\ c^2-u^2 & 2u\end{pmatrix}.\tag{5.7b}$$

在连续的情况下,Jacobi 矩阵 $A(U)$的特征值和特征向量为

$$\lambda_{1,2}=u-c,\ u+c,$$

$$w_{1,2}=\begin{pmatrix}1\\ u-c\end{pmatrix},\begin{pmatrix}1\\ u+c\end{pmatrix}.\tag{5.8}$$

取参向量

$$\omega=\begin{pmatrix}\omega_1\\ \omega_2\end{pmatrix}=\frac{1}{\sqrt{\rho}}U=\begin{pmatrix}\sqrt{\rho}\\ \sqrt{\rho}\,u\end{pmatrix},\tag{5.9}$$

那么函数向量和流向量 $U,f(U)$都可以用参向量表示

$$U=\begin{pmatrix}\omega_1^2\\ \omega_1\omega_2\end{pmatrix},\quad f(U)=\begin{pmatrix}\omega_1\omega_2\\ \omega_2^2+\omega_1c^2\end{pmatrix}.\tag{5.10}$$

现在我们来考察 Riemann 问题的情况. 此时的参向量的间断跳跃量应当是

$$[\omega]=\begin{pmatrix}[\omega_1]\\ [\omega_2]\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\sqrt{\rho_r}-\sqrt{\rho_l}\\ \sqrt{\rho_r}u_r-\sqrt{\rho_l}u_l\end{pmatrix}.\tag{5.11}$$

利用未知函数和流向量的间断跳跃量$[U]=\Delta U$, $[f(U)]=\Delta f$ 对参向量跳跃量的表示关系 (5.1),可以求到

$$\widetilde{B}=\begin{pmatrix}2\tilde{\omega}_1 & 0\\ \tilde{\omega}_2 & \tilde{\omega}_1\end{pmatrix},\ \widetilde{C}=\begin{pmatrix}\tilde{\omega}_2 & \tilde{\omega}_1\\ 2c^2\tilde{\omega}_1 & 2\tilde{\omega}_2^2\end{pmatrix},\tag{5.12a}$$

其中,$\tilde{\omega}_1,\tilde{\omega}_2$ 是线性化问题(5.5)的"参向量"

$$\tilde{\omega}=\begin{pmatrix}\tilde{\omega}_1\\ \tilde{\omega}_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\frac{1}{2}(\sqrt{\rho_l}+\sqrt{\rho_r})\\ \frac{1}{2}(\sqrt{\rho_l}u_l+\sqrt{\rho_r}u_r)\end{pmatrix}\tag{5.12b}$$

的分量. 注意,在上面的推导中,我们为了简单认为当地声速不变. 而且,这种近似对结果的影响微小. 如果不这样假定也可以,但是它的表示却没有像下面 (5.14) 式的一般性.

根据 (5.1),可得 Roe 的线性化矩阵

$$\widetilde{A}(U_l,U_r)=\widetilde{C}\widetilde{B}^{-1}=\begin{pmatrix}0 & 1\\ c^2-\tilde{u}^2 & 2\tilde{u}\end{pmatrix}.\tag{5.13}$$

可以见到和原 Jacobi 矩阵 $A(U)$的形式完全雷同，只是其中 $\bar{u}$ 改为原速度向量的质量加权平均

$$\bar{u} = \frac{\sqrt{\rho_l}u_l + \sqrt{\rho_r}u_r}{\sqrt{\rho_l} + \sqrt{\rho_r}}. \tag{5.14}$$

显然，Roe 的线性化矩阵的特征值和特征向量有类似的形式

$$\tilde{\lambda}_{1,2} = \tilde{u} - c,\ \tilde{u} + c;\ \tilde{e}_{1,2} = \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u} - c \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u} + c \end{pmatrix}. \tag{5.15}$$

下一步自然是求未知函数跳跃量的特征表示 (5.3)

$$[U] = \begin{pmatrix} [u_1] \\ [u_2] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_r - \rho_l \\ \rho_r u_r - \rho_l u_l \end{pmatrix} = \sum_{k=1}^{m} \tilde{\alpha}_k \tilde{e}_k, \tag{5.16a}$$

其中，展开系数 $\tilde{\alpha}_k$ 和 Roe 的线性化矩阵 $\tilde{A}(U_l, U_r)$一样推导，很麻烦但很关键

$$\tilde{\alpha}_1 = \frac{1}{2c}(\Delta u_1(\tilde{u} + c) - \Delta u_2),$$

$$\tilde{\alpha}_2 = \frac{1}{2c}(-\Delta u_1(\tilde{u} - c) + \Delta u_2). \tag{5.16b}$$

读者可能已经看出上述系数的量纲似乎有问题，事实上这是由于我们前面假定了当地声速不变引起的. 在本节的后面，就会见到不采用这种假定的情况，也就不会产生这个问题. 其实，上述的推导，读者可以在当地声速可变的情况下进行，结果会有所不同. 只要合适地表示当地声速，它们的 Roe 的线性化矩阵 $\widetilde{A}(U_l, U_r)$和特征量，以及展开式还是一样形式，不同的是当地声速表达式和展开系数公式不同而已. 而且，读者也可以对于这样得到的两种不同的形式，进行数值实验，从而看到它们的效果.

利用上述的公式(5.16)、(5.15)、(5.14)和(5.6)，我们容易构造数值流向量的格式.

5.3 二维浅水波问题的 Roe 参向量和近似 Riemann 解算子[5,6,31,236]

二维浅水波问题的数学模型，有各种各样的表示形式. 在这里讨论第一章里的模型(1.42)的紧凑形式，不妨重写于下面：

$$U_t + (f(U))_x + (g(U))_y = h(U),$$

$$f(U) = f^{\mathrm{I}} - \nu f^{\mathrm{II}}, g(U) = g^{\mathrm{I}} - \nu g^{\mathrm{II}}, \tag{1.42a}$$

其中

$$U = \begin{pmatrix} h \\ hu \\ hv \end{pmatrix} f^{\mathrm{I}} = \begin{pmatrix} uh \\ u^2h + gh^2/2 \\ uvh \end{pmatrix} g^{\mathrm{I}} = \begin{pmatrix} vh \\ vuh \\ v^2h + gh^2/2 \end{pmatrix},$$

$$f^{\mathrm{II}} = \begin{pmatrix} 0 \\ hu_x \\ hv_x \end{pmatrix} g^{\mathrm{II}} = \begin{pmatrix} 0 \\ hu_y \\ hv_y \end{pmatrix}, \tag{1.42b}$$

$$h = \begin{pmatrix} 0 \\ -gh(S_{fx} + S_{ax}) + hC_f v \\ -gh(S_{fy} + S_{ax}) - hC_f u \end{pmatrix},$$

其中的各种符号的物理意义,读者可以参见第一章的说明. 我们在这儿仅仅对于二维无黏性、无摩擦和河底无倾斜的理想情况进行讨论. 此时数学模型为齐次守恒形式

$$U_t + (f(U))_x + (g(U))_y = 0, \tag{5.17a}$$

其中

$$U = \begin{pmatrix} h \\ hu \\ hv \end{pmatrix} f = \begin{pmatrix} uh \\ u^2h + gh^2/2 \\ uvh \end{pmatrix} g = \begin{pmatrix} vh \\ vuh \\ v^2h + gh^2/2 \end{pmatrix}, \tag{5.17b}$$

或者写出其拟线性形式

$$U_t + A(U)U_x + B(U)U_y = 0, \tag{5.18a}$$

其中 Jacobi 矩阵

$$A = \frac{\partial f(U)}{\partial U} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ c^2 - u^2 & 2u & 0 \\ -uv & v & u \end{pmatrix},$$

$$B = \frac{\partial g(U)}{\partial U} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -vu & v & 0 \\ c^2 - v^2 & 0 & 2v \end{pmatrix}, \tag{5.18b}$$

这里也采用了类似的"声速"记号

$$c = \sqrt{gh}, \tag{5.18c}$$

它是重力加速度和水深的平均。在各种推导过程中,它也有类似于"当地声速"的作用. 不难推导两个 Jacobi 矩阵 A, B 的特征值和特征向量为

$$\lambda^a_{1,2,3} = u - c, u, u + c,$$

$$\lambda^b_{1,2,3} = v - c, v, v + c, \tag{5.19a}$$

$$w^a_{1,2,3} = \begin{pmatrix} 1 \\ u - c \\ v \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ u + c \\ v \end{pmatrix},$$

$$w^b_{1,2,3} = \begin{pmatrix} 1 \\ u \\ v-c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ -c \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ u \\ v+c \end{pmatrix}, \tag{5.19b}$$

利用上述的各种表达式,我们完全可以建立相应的二维浅水波问题的 Roe 参向量和近似 Riemann 解算子,然后采用分数步方法(fractional step methods)[248]进行数值求解.这项工作仍然留给读者.

在这里,我们特意采用另一种复合的紧凑形式进行.这种形式对于今后的实际应用,特别是对于二维问题的有限体积法(finite volume method,简称 FVM)的设计和构造,很有意义.因为根据 Green 公式,守恒律(5.17a)在任一面积控制元 e 上的积分都可以表示为

$$\int_e \{U_t + f(U)_x + g(U)_y\} \mathrm{d}x\mathrm{d}y = \int_e U_t \mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\partial e} f\mathrm{d}y - g\mathrm{d}x = 0$$

或者

$$\int_e U_t \mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\partial e} (f, g) \cdot \vec{n}\, \mathrm{d}x\mathrm{d}y = 0 .$$

因而,我们可以对于(5.17)引入复合流向量

$$\vec{F} = (f(U), g(U)), \quad \vec{F} \cdot \vec{n} = f(U) n_x + g(U) n_y, \tag{5.20}$$

其中,$\vec{n} = (n_x, n_y)$为参考曲线的外法向.进而也可以求出它的复合 Jacobi 矩阵

$$\bar{A} = \frac{\partial(\vec{F} \cdot \vec{n})}{\partial U} = \begin{pmatrix} 0 & n_x & n_y \\ (c^2 - u^2) n_x - uv n_y & 2u n_x + v n_y & u n_y \\ -uv n_x + (c^2 - u^2) n_y & v n_x & u n_x + 2v n_y \end{pmatrix}, \tag{5.21}$$

它的特征值为

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \vec{V} \cdot \vec{n} - c|\vec{n}|, & & \lambda_1 = u n_x + v n_y - cn, \\ \lambda_2 &= \vec{V} \cdot \vec{n}, & \text{或者} \quad & \lambda_2 = u n_x + v n_y, \\ \lambda_3 &= \vec{V} \cdot \vec{n} + c|\vec{n}| & & \lambda_3 = u n_x + v n_y + cn. \end{aligned} \tag{5.22}$$

这里简单地记 $n = |\vec{n}|$,在单位法向量的情况下 $n = |\vec{n}| = 1$.相应的复合(右)特征向量为

$$w_{1,2,3} = \begin{pmatrix} 1 \\ u - c n_x / n \\ v - c n_y / n \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -c n_x \\ c n_y \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ u + c n_x / n \\ v + c n_y / n \end{pmatrix}. \tag{5.23}$$

为了以后的拟特征线类方法的讨论,特别是迎风方法的设计,这里同时给出它的左特征向量

$$w_1^1 = \left(\frac{1}{2cn}(\hat{V}\cdot\vec{n} + cn),\ -\frac{n_x}{2cn},\ -\frac{n_y}{2cn}\right),$$

$$w_2^1 = \left(\frac{1}{n}(un_x - vn_y),\ -\frac{n_x}{n^2}, \frac{n_y}{n^2}\right), \tag{5.24}$$

$$w_3^1 = \left(\frac{1}{2cn}(-\hat{V}\cdot\vec{n} + cn),\ \frac{n_x}{2cn}, \frac{n_y}{2cn}\right).$$

根据开始介绍的 Roe 解算子的推导过程,应当求它对于 Riemann 问题的线性化替换矩阵 $\tilde{\tilde{A}} = \tilde{C}\tilde{B}^{-1}$. 但是适当的定义"当地声速"$\tilde{c}$ 而后,可以使其矩阵形式完全与原形 (5.21) 相同. 这里的"当地声速"$\tilde{c}$ 却不是质量加权平均,而是

$$\tilde{c} = \sqrt{\frac{1}{2}(h_l + h_r)}\ , \tag{5.25}$$

从而,相应的特征值和特征向量也与 (5.22) 和 (5.23) 相同. 如果法向量是单位向量,则

$$\begin{aligned} \tilde{\lambda}_1 &= \tilde{u}n_x + \tilde{v}n_y - \tilde{c}, \\ \tilde{\lambda}_2 &= \tilde{u}n_x + \tilde{v}n_y, \\ \tilde{\lambda}_3 &= \tilde{u}n_x - \tilde{v}n_y + \tilde{c} \end{aligned} \tag{5.26}$$

和

$$\tilde{e}_{1,2,3} = \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u} - \tilde{c}n_x \\ \tilde{v} - \tilde{c}n_y \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ -\tilde{c}n_x \\ \tilde{c}n_y \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u} + \tilde{c}n_x \\ \tilde{v} + \tilde{c}n_y \end{pmatrix}, \tag{5.27}$$

其中 $\tilde{u}, \tilde{v}$ 也是像前面一维情况那样,为质量加权平均,采用记号

$$\begin{aligned} \tilde{u} &= \frac{\langle u\sqrt{h}\rangle}{\langle\sqrt{h}\rangle} = \frac{u_l\sqrt{h_l} + u_r\sqrt{h_r}}{\sqrt{h_l} + \sqrt{h_r}}, \\ \tilde{v} &= \frac{\langle v\sqrt{h}\rangle}{\langle\sqrt{h}\rangle} = \frac{v_l\sqrt{h_l} + v_r\sqrt{h_r}}{\sqrt{h_l} + \sqrt{h_r}}. \end{aligned} \tag{5.28}$$

Riemann 间断解的跳跃量展开为

$$[U] = \begin{pmatrix} [h] \\ [uh] \\ [vh] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} h_r - h_l \\ u_rh_r - u_lh_l \\ v_rh_r - v_lh_l \end{pmatrix} = \sum_{k=1}^{m} \tilde{\alpha}_k\tilde{e}_k, \tag{5.29}$$

其中展开系数

$$\begin{aligned} \tilde{\alpha}_{1,3} &= \frac{[h]}{2} \mp \frac{1}{2\tilde{c}}([hu]n_x + [hv]n_y - \tilde{V}\cdot\vec{n}\,[h]), \\ \tilde{\alpha}_2 &= \frac{1}{\tilde{c}}(([hv] - \tilde{v}[h])n_x - ([hu] - \tilde{u}[h])n_y). \end{aligned} \tag{5.30}$$

有了上述的解算子,对于一般的二维浅水波方程的数值解,就可以采用前

面所提的数值流向量方法，通过求解每一个时间层的 Riemann 问题列，得到 Roe 型的数值流向量差分格式

$$(F\cdot n)_{lr}=\frac{1}{2}\left\{(F\cdot n)_l+(F\cdot n)_r-\sum\tilde{\alpha}_k\mid\tilde{\lambda}_k\mid\tilde{e}_k\right\},\qquad(5.31)$$

这种形式将在今后的 TVD、有限体积法和间断 Galerkin 方法等讨论中经常看到.

5.4 Roe 的三维守恒律问题的参向量和解算子

现在，我们进一步考虑三维的 Euler 方程问题，介绍三维守恒律问题的 Roe 参向量和解算子的一个全过程. 方程为

$$U_t+f(U)_x+g(U)_y+h(U)_z=0,\qquad(5.32a)$$

其中

$$U=\begin{pmatrix}\rho\\ \rho u\\ \rho v\\ \rho w\\ e\end{pmatrix},\quad f=\begin{pmatrix}\rho u\\ \rho u^2+p\\ \rho uv\\ \rho uw\\ u(e+p)\end{pmatrix},\quad g=\begin{pmatrix}\rho v\\ \rho v\\ \rho v^2+p\\ \rho vw\\ v(e+p)\end{pmatrix},\quad h=\begin{pmatrix}\rho w\\ \rho wu\\ \rho wv\\ \rho w^2+p\\ w(e+p)\end{pmatrix},\qquad(5.32b)$$

这里 $\rho,p,\vec{V}=(u,v,w),e$ 分别为密度、压力、三个坐标方向的速度向量和单位体积的总能量. 对于完全气体有状态方程联结各个未知函数

$$e=\frac{p}{\gamma-1}+\frac{1}{2}\rho\mid\vec{V}\mid^2.\qquad(5.32c)$$

与前面的二维浅水波问题不同，我们不再采用复合的形式，而是直接对于每一个流通量函数 $f(U),g(U),h(U)$，构造 Roe 的数值流通量 $\tilde{f},\tilde{g},\tilde{h}$. 从上面的讨论，读者已经可以看到，显然不必生成流通量函数 $f(U),g(U),h(U)$的线化 Jacobi 矩阵 $\tilde{A},\tilde{B},\tilde{C}$. 我们只是需要得到上述线化 Jacobi 矩阵的相应特征向量 $\tilde{e}_k$ 和未知函数向量$[U]$对于它们的展开系数 $\tilde{\alpha}_k$.

选取参向量

$$\omega=\sqrt{\rho}(1,u,v,w,h)^{\mathrm{T}},\quad\rho h=e+p,\qquad(5.33)$$

其中 h 为单位体积的总焓. 于是 U,f,g,h 都可以由参向量表示. 例如

$$u_1=\omega_1^2,\cdots,\quad u_5=\frac{\omega_1\omega_5}{\gamma}+\frac{\gamma-1}{2\gamma}\mid\vec{V}\mid^2,$$

$$f_2=\frac{\gamma-1}{\gamma}\omega_1\omega_5+\frac{\gamma+1}{2\gamma}\omega_2^2-\frac{\gamma-1}{2\gamma}(\omega_3^2+\omega_4^2),$$

$$\cdots,g_4=\omega_3\omega_4,\cdots,$$

并注意对称的特征，不难求出它们的具体展开形式．而且，它们的间断解跳跃量有参向量的跳跃量的展开表示

$$
\begin{aligned}
[U] &= U_r - U_l = \widetilde{D}(\omega_r - \omega_l),\\
[f(U)] &= f_r - f_l = \widetilde{C}_F(\omega_r - \omega_l),\\
[g(U)] &= g_r - g_l = \widetilde{C}_G(\omega_r - \omega_l),\\
[h(U)] &= h_r - h_l = \widetilde{C}_H(\omega_r - \omega_l).
\end{aligned}
\tag{5.34a}
$$

例如

$$
\widetilde{D} = \begin{pmatrix}
2\tilde{\omega}_1 & 0 & 0 & 0 & 0\\
\tilde{\omega}_2 & \tilde{\omega}_1 & 0 & 0 & 0\\
\tilde{\omega}_3 & 0 & \tilde{\omega}_1 & 0 & 0\\
\tilde{\omega}_4 & 0 & 0 & \tilde{\omega}_1 & 0\\
\dfrac{\tilde{\omega}_5}{\gamma} & \dfrac{\gamma-1}{\gamma}\tilde{\omega}_2 & \dfrac{\gamma-1}{\gamma}\tilde{\omega}_3 & \dfrac{\gamma-1}{\gamma}\tilde{\omega}_5 & \dfrac{\tilde{\omega}_1}{\gamma}
\end{pmatrix}, \tag{5.34b}
$$

$$
\widetilde{C}_f = \begin{pmatrix}
\tilde{\omega}_2 & \tilde{\omega}_1 & 0 & 0 & 0\\
\dfrac{\gamma-1}{\gamma}\tilde{\omega}_5 & \dfrac{\gamma+1}{\gamma}\tilde{\omega}_2 & -\dfrac{\gamma-1}{\gamma}\tilde{\omega}_3 & -\dfrac{\gamma-1}{\gamma}\tilde{\omega}_4 & \dfrac{\gamma-1}{\gamma}\tilde{\omega}_1\\
0 & \tilde{\omega}_3 & \tilde{\omega}_2 & 0 & 0\\
0 & \tilde{\omega}_4 & 0 & \tilde{\omega}_2 & 0\\
0 & \tilde{\omega}_5 & 0 & 0 & \tilde{\omega}_2
\end{pmatrix}, \tag{5.34f}
$$

其中，$\tilde{\omega}_i(i=1,\cdots,5)$的表达式与 (5.12b) 类似，即

$$
\begin{aligned}
\tilde{\omega}_1 &= \frac{1}{2}\left(\sqrt{\rho_l} + \sqrt{\rho_r}\right),\\
\tilde{\omega}_2 &= \frac{1}{2}\left(\sqrt{\rho_l}u_l + \sqrt{\rho_r}u_r\right),\\
\tilde{\omega}_3 &= \frac{1}{2}\left(\sqrt{\rho_l}v_l + \sqrt{\rho_r}v_r\right).
\end{aligned}
\tag{5.35}
$$

…………

类似地，其他的几个变换矩阵 $\widetilde{C}_g$，$\widetilde{C}_h$，可以根据它们的对称性和可交换的特点，由 $\widetilde{C}_f$ 作相应的改变得到．事实上，一旦有了 $\widetilde{D}$，$\widetilde{C}$ 并适当地定义“当地声速”$\tilde{c}$ 后，可以使其矩阵形式完全与原形相同．这里的“当地声速”$\tilde{c}$ 是

$$
\tilde{c} = (\gamma - 1)\left[\tilde{h} - \frac{1}{2}(\tilde{u}^2 + \tilde{v}^2 + \tilde{w}^2)\right]. \tag{5.36}
$$

事实上，我们并不必去推导 Roe 的线性化矩阵 $\widetilde{A}$，因为我们的目的是它的特征值和特征向量．而求它的特征值，也可以通过解下面的特征方程

$$
\det(\widetilde{C} - \lambda\widetilde{D}) = 0 \tag{5.37}
$$

得到. 如果引入质量加权平均量

$$\tilde{f} = \frac{\langle f\sqrt{\rho}\rangle}{\langle\sqrt{\rho}\rangle} = \frac{f_l\sqrt{\rho_l} + f_r\sqrt{\rho_r}}{\sqrt{\rho_l} + \sqrt{\rho_r}},$$
$$f = u, v, w, h, \tag{5.38}$$

或者写成

$$\tilde{u} = \frac{\tilde{\omega}_2}{\tilde{\omega}_1}, \quad \tilde{v} = \frac{\tilde{\omega}_3}{\tilde{\omega}_1}, \quad \tilde{w} = \frac{\tilde{\omega}_4}{\tilde{\omega}_1}, \quad \tilde{h} = \frac{\tilde{\omega}_5}{\tilde{\omega}_1}, \tag{5.39}$$

则式 (5.37) 展开可得

$$(\tilde{\lambda} - \tilde{u})^3\left[(\tilde{\lambda} - \tilde{u})^2 - (\gamma - 1)\left\{\tilde{h} - \frac{1}{2}|\tilde{V}|^2\right\}\right] = 0,$$
$$|\tilde{V}|^2 = \tilde{u}^2 + \tilde{v}^2 + \tilde{w}^2, \tag{5.40}$$

因此,特征值即为

$$\tilde{\lambda}_{1,\cdots,5} = \tilde{u} - \tilde{c}, \tilde{u}, \tilde{u}, \tilde{u}, \tilde{u} + \tilde{c} . \tag{5.41}$$

而相应的特征向量是

$$\tilde{e}_{1,\cdots,5} = \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u} - \tilde{c} \\ \tilde{v} \\ \tilde{w} \\ \tilde{h} - \tilde{u}\tilde{c} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \tilde{v} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ \tilde{w} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u} \\ \tilde{v} \\ \tilde{w} \\ \frac{1}{2}\tilde{V}^2 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 \\ \tilde{u} + \tilde{c} \\ \tilde{v} \\ \tilde{w} \\ \tilde{h} + \tilde{u}\tilde{c} \end{pmatrix}. \tag{5.42}$$

最后,未知向量函数的跳跃量展开式

$$[U] = U_r - U_l = \sum_{k=1}^{5}\tilde{\alpha}_k\tilde{e}_k \tag{5.43}$$

可以得到系数满足下述方程组(也是求解的顺序):

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{c}^2}{\gamma - 1}\tilde{\alpha}_4 &= (\tilde{h} - |\tilde{V}|^2)[u_1] + \tilde{u}[u_2] + \tilde{v}[u_3] + \tilde{w}[u_4] - [u_5], \\ \tilde{v}\tilde{\alpha}_2 &= [u_3] - \tilde{v}[u_1], \\ \tilde{w}\tilde{\alpha}_3 &= [u_4] - \tilde{w}[u_2], \\ \tilde{\alpha}_1 + \tilde{\alpha}_5 &= [u_1] - \tilde{\alpha}_4, \\ \tilde{\alpha}_1 - \tilde{\alpha}_5 &= (\tilde{u}[u_1] - [u_2])/\tilde{c} . \end{aligned} \tag{5.44}$$

相仿地,可以求得对于流通量 g, h 的线性化替换矩阵的特征值、特征向量和展开系数 $\tilde{\mu}_k, \tilde{\nu}_k; \tilde{e}_k(\tilde{B}_k), \tilde{e}_k(\tilde{C}); \tilde{\beta}_k, \tilde{\gamma}_k$.

有了上述的一系列结果,我们已经可以得到三维问题的 Roe 型的数值格式

$$\begin{aligned} U_{ijk}^{n+1} = U_{ijk}^{n} &- \frac{\Delta t}{\Delta x}\left\{\tilde{f}_{i+\frac{1}{2},j,k} - \tilde{f}_{i-\frac{1}{2},j,k}\right\} \\ &- \frac{\Delta t}{\Delta y}\left\{\tilde{g}_{i,j+\frac{1}{2},k} - \tilde{g}_{i,j-\frac{1}{2},k}\right\} - \frac{\Delta t}{\Delta z}\left\{\tilde{h}_{i,j,k+\frac{1}{2}} - \tilde{h}_{i,j,k-\frac{1}{2}}\right\}, \end{aligned} \tag{5.45a}$$

其中数值流向量分别是

$$\bar{f}_{i+\frac{1}{2},j,k}=\frac{1}{2}\Big\{f_{i,j,k}+f_{i+1,j,k}-\sum_{k=1}^{m}\tilde{\alpha}_k\,|\,\tilde{\lambda}_k\,|\,\tilde{e}_k(\tilde{A})\Big\},$$

$$\bar{g}_{i,j-\frac{1}{2},k}=\frac{1}{2}\Big\{g_{i,j,k}+g_{i,j+1,k}-\sum_{k=1}^{m}\tilde{\beta}_k\,|\,\tilde{\mu}_k\,|\,\tilde{e}_k(\tilde{B})\Big\},\qquad(5.45b)$$

$$\bar{h}_{i,j,k+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}\Big\{h_{i,j,k}+h_{i,j,k+1}-\sum_{k=1}^{m}\tilde{\gamma}_k\,|\,\tilde{\nu}_k\,|\,\tilde{e}_k(\tilde{C})\Big\}.$$

Roe 在他的论文中,还对于超声速流的计算进行了进一步的讨论,感兴趣的读者可以查阅. 也可以参考 Toro 的 Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics 一书.

5.5 Roe 方法提高求解精度的关键和存在的问题

读者可能已经看到在 Roe 的参向量、间断解展开、线性化替换矩阵和间断解未知函数的跳跃量的特征表示,等等,都是在最简单的左右常数态的假定下进行的. 但是,这种左右常数态的假定,却从根本上限制了方法的精度. 这也就是 Roe 方法的提高精度的局限性和根本问题.

今后,随着本课程的展开,我们将会知道,即使对于每一个差分网格内的未知函数作常数态对待,在产生激波等的间断解时,间断解的左右两侧也应当进行比较精确的逼近构造,以确保近似解的尽可能的高精度. 例如 Van Leer 的 MUSCL 方法,Collela 等人的 PPM,甚至 TVD、ENO 等方法也同样具有这些特点.

出于这种考虑,Ben-Artzi 也提出了称为"广义的 Riemann 问题"的方法(general Riemann problem,简称 GRP 方法)[15]. 而且作者主要是针对非齐次的守恒型问题设计的. 其根本点就在于间断解左右函数不再是常数态,而是线性函数构造

$$U_t+f(U)_x=0,$$

$$U(x,t_n)=U_n(x)=\begin{cases}U_-^n(x),\ x_i\leqslant x<x_{i+\frac{1}{2}},\\ U_+^n(x),\ x_{i+\frac{1}{2}}\leqslant x\leqslant x_{i+1},\end{cases}\qquad(5.46a)$$

而且满足条件

a. $U_\pm=U_\pm(x_{i+\frac{1}{2}},t_n)=\lim\limits_{x\to x_{i+\frac{1}{2}}^{\pm}}U(x,t_n)$,

b. $\partial_tU_\pm(x_{i+\frac{1}{2}},t_n)=\lim\limits_{x\to x_{i+\frac{1}{2}}^{\pm}}\partial_tU(x,t_n)$. (5.46b)

不过这样一来,上面的间断解的"初值问题"已经不是"自相似"的. 为此,作者

又进一步提出了一个"相伴 Riemann 问题"(associate RP)定义

$$(U_{rp})_\tau + f(U_{rp})_\zeta = 0,$$

$$U_{rp}(\zeta,0) = \begin{cases} U_- , & \zeta < 0, \\ U_+ , & \zeta \geqslant 0, \end{cases} \tag{5.47}$$

它有相似解 $U_{rp}(\zeta,\tau) = R(\zeta/\tau)$. GRP 方法根据相伴 Riemann 问题的解，利用某种合理的变换得到.

此外，由于 Roe 方法，包括各种构造性的 Riemann 问题方法，都在不同程度上利用了物理或力学中这些守恒型方程的流向量特点. 就是

$$f(U) = A(U) \cdot U,$$

$$f_r - f_l = \tilde{A}(U_r, U_l)(U_r - U_l), \tag{5.48}$$

所以，对于比较一般的问题有难以克服的困难.

练习题

1. 简单的单向波方程 $u_t + au_x = 0$, $a = \text{const} > 0$，试讨论它的 Riemann 解问题的 Roe 型的数值流向量.
2. 对于方波碰撞的简单模型方程(1.7)和 Riemann 初值条件

$$U(x,0) = U_0(x) = \begin{cases} U_l, & 当\ x < 0, \\ U_r, & 当\ x > 0, \end{cases}$$

试导出它的数值流向量型的差分方案.
3. 就简单的气体力学(5.7)Riemann 问题，设计一种 Roe 型的数值方法.
4. 对于问题(1.28～1.29)的 Riemann 问题，试讨论它的 Roe 方法和相关的参向量、展开系数和流向量格式.
5. 对于二维的 Euler 方程的 Riemann 问题，采用二维浅水波的复合方式，设计 Roe 型方法.

第六章　积分平均型间断解方法的设计和讨论

积分平均型的有限差分方法的设计，在许多参考书目中都可以得到一个初步的了解．所以，我们不再讨论有关的概念和基本思想．现在的目的是针对间断解的要求，介绍行之有效的间断解方法的设计思想，例如著名 Van Leer 的 MUSCL(monotonic upstream-centred scheme for conservation laws)[227~230] 格式和 Collela 与 Woodward 的 PPM (piecewise parabolic method)(参见文献[44,45,244,245])等．这些方法的设计虽然也是积分平均形式下的差分离散方法，可是其特点却非常强调每一个网格上的积分平均意义上的常数态假定．在这种意义上来说，好像也具有 Riemann 间断解问题的基本特征．但是，从本质上来讲，它的常数态的构造是总体的、积分平均意义上的．前一章里的讨论在每一个网格内的常数态，只是把节点函数值向左右开拓，所构成的常数态，实质上它仍属于插值逼近的一种间断解捕捉型方法．

1969 年以来，Van Leer 陆续地发表了一系列的重要论文，开创性地提出了间断解问题的积分平均形式下差分格式的构造方法，特别是提出了一种行之有效的间断解差分方法 MUSCL．它细致、精良的设计和构造思想，无疑对而后的间断解数值方法的发展起了巨大的推动作用．1984 年，Collela 和 Woodward 在前者的基础上，根据保守恒和单调的原则，进一步提出了另一种高阶的间断解差分方法，他们特别地称为 PPM．在这一节里我们将分别予以分析和讨论．

通过上一章的讨论，想来读者也就容易接受这类间断解方法的设计和构造机理．同时，应当注意到它们的不同的构造思想和实现程序．

6.1　积分平均型守恒、单调格式的一般构想

仍然以最简单的模型方程(见第一章)

$$u_t + au_x = h(x,t),\ a = \text{const} > 0, \tag{6.1}$$

$$u(x,0) = u_0(x) \tag{6.2}$$

为例．利用特征线的分析方法，不难得到上述问题的解析解

$$u(x,t) = u_0(x - at) + \int_0^t h(x - a(t-\tau),\tau)\mathrm{d}\tau. \tag{6.3}$$

在差分网格上，取积分控制元 $\Omega_i^n = [x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \times [t_n, t_{n+1}]$，求方程(1.1) 在控制元上的积分，得

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}[u^{n+1}(x)-u^n(x)]\mathrm{d}x+\int_{t_n}^{t_{n+1}}[au_{i+\frac{1}{2}}(t)-au_{i+\frac{1}{2}}(t)]\mathrm{d}t$$

$$=\int_{\Omega_i^n}h\mathrm{d}x\mathrm{d}t\ . \tag{6.4}$$

定义空间网格上的积分平均函数

$$\bar{u}_i^n=\frac{1}{\Delta x}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}u^n(x)\mathrm{d}x,\quad \Delta x=x_{i+\frac{1}{2}}-x_{i-\frac{1}{2}} \tag{6.5}$$

和时间网格上的积分平均

$$\langle a\bar{u}_{i+\frac{1}{2}}^n\rangle=\frac{1}{\Delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}}au_{i+\frac{1}{2}}(t)\mathrm{d}t,\Delta t=t_{n+1}-t_n. \tag{6.6}$$

由于在上述的定义中,当 $t>t_n$ 时函数 $u_i(t)$ 未知,可以通过沿特征线的输运给出近似. 为此,我们必须要求时间步长 Δt 满足 CFL 条件 $c=a\Delta t/\Delta x<1$,以便保证特征线的依赖域不超越当前的 Riemann 问题区间. 时间的积分平均(6.6)式最简单的一阶近似即为

$$\langle a\bar{u}_{i+\frac{1}{2}}\rangle=\begin{cases}a\bar{u}_i^n, & a\geqslant 0,\\ a\bar{u}_{i+1}^n, & a<0\ .\end{cases} \tag{6.7}$$

于是 (6.4) 式可以写为

$$\bar{u}_i^{n+1}=\bar{u}_i^n-r\left(\langle a\bar{u}_{i+\frac{1}{2}}\rangle-\langle a\bar{u}_{i-\frac{1}{2}}\rangle\right)+\Delta x\Delta t\bar{h}_i^n,$$

$$=\begin{cases}\bar{u}_i^n-r(a\bar{u}_i^n-a\bar{u}_{i-1}^n)+\Delta x\Delta t\bar{h}_i^n, & a\geqslant 0,\\ \bar{u}_i^n-r(a\bar{u}_{i+1}^n-a\bar{u}_i^n)+\Delta x\Delta t\bar{h}_i^n, & a<0,\end{cases}\quad r=\frac{\Delta t}{\Delta x}. \tag{6.8a}$$

为简单起见,我们考虑 $a=\mathrm{const}, h=0$,这样上式简化为熟知的迎风格式 (upwind scheme)

$$\bar{u}_i^{n+1}=\begin{cases}\bar{u}_i^n-c(\bar{u}_i^n-\bar{u}_{i-1}^n), & a\geqslant 0,\\ \bar{u}_i^n-c(\bar{u}_{i+1}^n-\bar{u}_i^n), & a<0,\end{cases}\quad c=\frac{a\Delta t}{\Delta x}\ . \tag{6.8b}$$

其实,上述格式的构造过程,也完全可以按另一种方式,或者另一种角度进行,这就是 Van Leer 提出的在积分平均形式下的沿特征方向输运的构造方案.

欲求 $t=t_{n+1}$ 时刻的值,我们采用以下的程序实现:

第一步　积分平均步

在积分平均 (6.5) 定义下,形成 $t=t_n$ 上的阶梯函数 $\{\bar{u}_i^n\}$.

第二步　"初值函数"构造步

构造 $t=t_n$ 时间层上的"初值函数"

$$u(x,t_n)=\bar{u}_{\mathrm{ini}}(\bar{u}_{i-l}^n,\cdots,\bar{u}_{i+k}^n),\quad x_{i-\frac{1}{2}}\leqslant x<x_{i+\frac{1}{2}},$$

其中,构造所采用的节点分布我们称为节点模板 (stencil). 如果就用上述阶

梯函数作为这个"初值函数"($l=k=0$),即

$$u(x,t_n)=u_{\text{ini}}(\bar{u}_i^n)=\bar{u}_i^n,\quad x_{i-\frac{1}{2}}\leqslant x<x_{i+\frac{1}{2}},$$

格式就是一阶的;如果进一步,利用上述的阶梯函数再作线性、二次的单调性的或者迎风(upwinding)的插值构造,这将得到高阶形式"初值函数".此外,也可以采用 Roe 的解算子,或其他 Godunov 型的方法进行构造.

第三步 特征移位步

如果仅就以此阶梯函数作为初值,对原方程积分,即解初值问题

$$u_t+au_x=0,\ t_n<t<t_{n+1},\ a=\text{const}>0,\tag{6.9}$$

$$u(x,t_n)=u_{\text{ini}}(x)=\bar{u}_i^n,\ x_{i-\frac{1}{2}}\leqslant x<x_{i+\frac{1}{2}},\ \forall i.\tag{6.10}$$

很显然,因为方程的平移特点,它的解也是阶梯函数

$$u(x,t_{n+1})=u(x-a\Delta t,t_n)=u_{\text{ini}}(x-c\Delta x),\tag{6.11a}$$

在形式上就是将阶梯函数 $\{\bar{u}_i^n\}$ 向右平移 $c\Delta x$. 从而得

$$u(x,t_{n+1})=\begin{cases}\bar{u}_{i-1}^n,\ x_{i-\frac{1}{2}}\leqslant x<x_{i-\frac{1}{2}}+c\Delta x,\\ \bar{u}_i^n,\ x_{i-\frac{1}{2}}+c\Delta x\leqslant x<x_{i+\frac{1}{2}},\end{cases}\quad x\in\left[x_{i-\frac{1}{2}},x_{i+\frac{1}{2}}\right),\forall i.\tag{6.11b}$$

第四步 计算输运步

这是形成 $t=t_{n+1}$ 时刻的阶梯函数,利用(6.11b)式积分

$$\begin{aligned}\bar{u}_i^{n+1}&=\frac{1}{\Delta x_i}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}u(x,t_{n+1})\mathrm{d}x\\&=\frac{1}{\Delta x_i}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}u(x-c\Delta x,t_n)\mathrm{d}x.\end{aligned}\tag{6.12a}$$

在最简单的常数"初值函数"情况下,可得

$$\begin{aligned}\bar{u}_i^{n+1}&=(1-c)\bar{u}_i^n+c\bar{u}_{i-1}^n\\&=\bar{u}_i^n-c(\bar{u}_i^n-\bar{u}_{i-1}^n),\ a>0.\end{aligned}\tag{6.12b}$$

这是在平移后的阶梯函数上,重新进行积分平均.对于 $a<0$ 的情况,可以进行类似的讨论.

图6.1表现了上述在积分平均下的常数"初值函数"的四步过程.显然,第二步里构造的 $t=t_n$ 时间层上的"初值函数" $u(x,t_n)$,其精度和质量直接关系到这种方法的逼近精度、可靠性和有效性.这是问题的关键所在.如果采用的就是分段常数的阶梯函数,则称为 PCM (piecewise constant method).如果是线性函数的构造,称为 PLM (piecewise linear method).进一步,如果采用的是二次构造,也就是 PPM (piecewise parabolic method,不过这里指的是一般二阶积分平均型格式,并非 Collela 的 PPM).

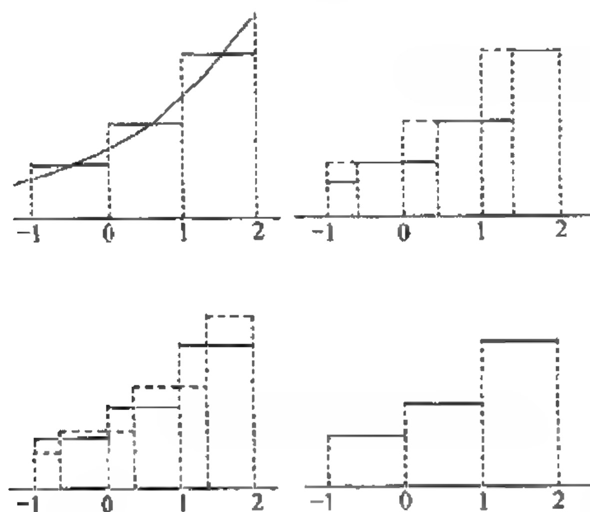


图 6.1　利用特征转换的积分平均过程

需要指出的是,对于线性和二次的构造,事实上是不惟一的. 因此,就产生了不同的构造原则,从而也就有不同的具体方法和表达形式. 通常的原则,一是保积分平均的守恒性的构造;二是保"初值函数"的单调性的构造. 前者是显而易见的. 后者是为了避免引入新的振荡因素,保持稳定和可能的分辨率. 所谓保单调,即保持解的单调特征,既不可生成新的极值,也不能放大极值. 当然,对于强对流问题可能迎风特征的要求应当更加重视.

下面首先以线性的"初值函数"为例,进行讨论.

考虑一个空间网格$[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$,中点在 $x = x_i$,其积分平均的函数值为 $\bar{u}_i^n$. 要求在该网格内,寻找一种合理的、通过中心点$(x_i, \bar{u}_i^n)$的线性插值,保持积分平均的原来面积意义上的守恒. 很显然,选择是不惟一的. 但是,有四种选择具有特别的意义(见图 6.2 (a) 所示). 这就是:

(1) 左线性插值. 联结左侧网格中点$(x_{i-1}, \bar{u}_{i-1}^n)$和$(x_i, \bar{u}_i^n)$斜率 (left single-side difference)

$$u(x, t_n) = \bar{u}_i^n + S_l(x - x_i),$$
$$S_l = \frac{\bar{u}_i^n - \bar{u}_{i-1}^n}{x_i - x_{i-1}},\ x \in \left[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}\right]. \tag{6.13a}$$

(2) 右线性插值. 联结右侧网格中点$(x_{i+1}, \bar{u}_{i-1}^n)$和$(x_i, \bar{u}_i^n)$斜率 (right single-side difference)

$$u(x, t_n) = \bar{u}_i^n + S_r(x - x_i),$$
$$S_r = \frac{\bar{u}_{i+1}^n - \bar{u}_i^n}{x_{i+1} - x_i},\ x \in \left[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}\right]. \tag{6.13b}$$

(3) 中心线性插值. 联结左右网格中点$(x_{i+1}, \bar{u}_{i-1}^n)$和$(x_{i-1}, \bar{u}_{i-1}^n)$斜率

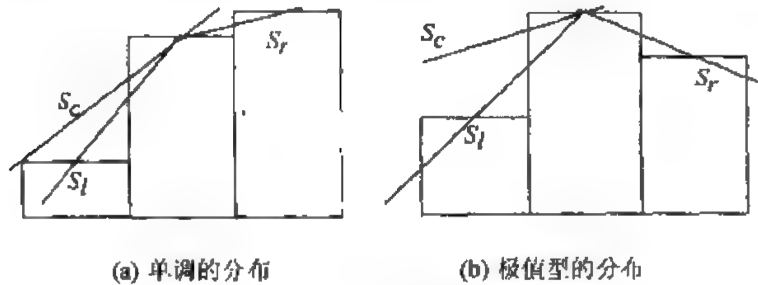
(central difference)

$$
u(x,t_n)=\bar{u}_i^n+S_c(x-x_i),\quad S_c=\frac{\bar{u}_{i+1}^n-\bar{u}_{i-1}^n}{x_{i+1}-x_{i-1}},\ x\in[x_{i-\frac{1}{2}},x_{i+\frac{1}{2}}]. \tag{6.13c}
$$

(4) 原常数斜率. 直接就取常数态的水平线,或者说斜率为 0

$$
u(x,t_n)=\bar{u}_i^n,\quad S_0=0,\ x\in[x_{i-\frac{1}{2}},\ x_{i+\frac{1}{2}}]. \tag{6.13d}
$$

那么,我们应当如何作出合理的选择呢? 这就需要符合单调性的要求. 这种选择的方式要根据阶梯函数的两种不同情况区别对待. 事实上,仅仅考虑它们的斜率即可.



(a) 单调的分布　　(b) 极值型的分布

图 6.2 被积函数的重构方式

情况 1. 阶梯函数从左侧网格到右侧网格呈现单调分布,此时选择合理的斜率为 (图 6.2(a))

$$
u(x,t_n)=\bar{u}_i^n+S(x-x_i),\ x\in[x_{i-\frac{1}{2}},x_{i+\frac{1}{2}}],\quad S=\min(|S_l|,|S_r|,|S_c|). \tag{6.14a}
$$

情况 2. 阶梯函数从左侧网格到右侧网格呈现极值分布,此时合理的斜率选择为 (图 6.2(b))

$$
u(x,t_n)=\bar{u}_i^n+S_0(x-x_i)=\bar{u}_i^n,\quad x\in[x_{i-\frac{1}{2}},x_{i+\frac{1}{2}}]. \tag{6.14b}
$$

这就是说,从总体上来看,这种构造保证了单调性,避免引入人为的不稳定因素,从而消除了可能产生的虚假震荡.

同样地,对于二阶的"初值函数"的构造,也要求既保面积的守恒,同时又保单调. 不同的是这时候的左、右、中心二阶插值"初值函数"的构造,必然要引入更多的节点. 换句话说,构造"初值函数"的节点模板扩展了. 从而又提出了关于节点模板的选择问题. 在而后的 ENO 方法的讨论和研究中,我们会介绍关于节点模板和一般情况下的斜率的选择问题,特别是舒其望(Chi-

Wang Shu)关于在这方面的总结性的工作[203].

有人或许要问,是否能够寻找一种简单而又确定的线性,或者二阶的"初值函数"形式,既可避开上述的节点模板的选择和斜率的选择,又能够基本保持守恒和单调性的要求呢?有,这就是 Van Leer ,Collela 等人的贡献的一个方面.

在而后的 ENO 和 weighted ENO 的讨论和分析中,读者将会看到更高阶的积分平均格式节点模板的合理选择,以及插值函数的巧妙的构造策略,它将 Van Leer 的思想和方法大大地向前推进了.

6.2　Van Leer 的 MUSCL 方法的构造

我们注意到这种格式的构造是从基本的定义 (6.4)～(6.6) 出发的. 而 (6.6) 式的时间积分平均的逼近尤其关键. 显然,前面的 (6.7) 式的近似是非常粗糙的. 于是我们也可以根据时间积分平均的 (6.6) 式,构造一种更好的近似. 如图 6.3 所示,利用特征线的变量转换关系,我们有

$$\begin{aligned}\langle \bar{u}^n_{i+\frac{1}{2}} \rangle &= \frac{1}{\Delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}} u(x_{i+\frac{1}{2}}, t)\mathrm{d}t, \\ &= \frac{1}{\Delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}} u\left(x_i + \frac{1}{2}\Delta x - a(t - t_n), t_n\right)\mathrm{d}t, a > 0 \qquad (6.15\text{a})\end{aligned}$$

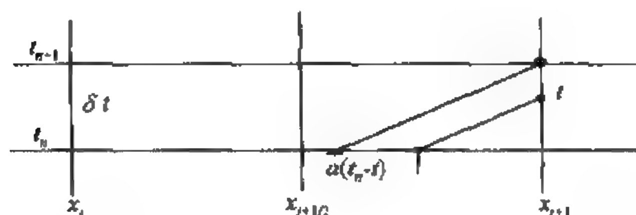


图 6.3　积分(6.15)式的特征转化

如果我们对于上述积分采用简单的梯形公式,并且采用被积函数的一阶 Taylor 展开,则有

$$\begin{aligned}\langle \bar{u}^n_{i+\frac{1}{2}} \rangle &= \frac{1}{\Delta t}\left\{\left[\bar{u}^n_i + \left(\frac{1}{2}\Delta x - a\Delta t\right)\frac{\partial \bar{u}^n_i}{\partial x}\right]\right. \\ &\quad \left. + \left[\bar{u}^n_i + \left(\frac{1}{2}\Delta x - 0\right)\frac{\partial \bar{u}^n_i}{\partial x}\right]\right\}/2 \cdot \Delta t \\ &= \bar{u}^n_i + \frac{1}{2}(\Delta x - a\Delta t)\frac{\partial \bar{u}^n_i}{\partial x}\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
&= \bar{u}_i^n + \frac{1}{2}(1-c)\frac{\partial \bar{u}_i^n}{\partial x}\Delta x \\
&\simeq \bar{u}_i^n + \frac{1}{2}(1-c)\Delta \bar{u}_i^n \\
&= \bar{u}_i^n + \frac{1}{4}(1-c)\left(\Delta \bar{u}_{i+\frac{1}{2}}^n + \Delta \bar{u}_{i-\frac{1}{2}}^n\right),
\end{aligned}
$$

其中,最后一项是为了避免引入中心格子点 $x_{i\pm1/2}$上的函数值而利用了算术平均替换. 同样地,还有

$$
\begin{aligned}
\langle \bar{u}_{i-\frac{1}{2}}^n \rangle &= \frac{1}{\Delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}} u(x_{i-\frac{1}{2}}, t)\mathrm{d}t \\
&= \frac{1}{\Delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}} u\left(x_{i-1} + \frac{1}{2}\Delta x - a(t-t_n), t_n\right)\mathrm{d}t \\
&= \bar{u}_{i-1}^n + \frac{1}{4}(1-c)(\Delta \bar{u}_{i+\frac{1}{2}}^n + \Delta \bar{u}_{i-\frac{3}{2}}^n), \quad a > 0,
\end{aligned} \tag{6.15b}
$$

将上述两式代入 (6.4) 式,我们可以得到二阶的 Van Leer 格式

$$
\begin{aligned}
\bar{u}_i^{n+1} &= \bar{u}_i^n - c(\langle \bar{u}_{i+\frac{1}{2}} \rangle - \langle \bar{u}_{i-\frac{1}{2}} \rangle) + \Delta x \Delta t \bar{h}_i^n, \\
&= \begin{cases} \bar{u}_i^n - c(u_i^n - \bar{u}_{i-1}^n) + \dfrac{1}{4}c(1-c)(\Delta \bar{u}_{i+\frac{1}{2}}^n - \Delta \bar{u}_{i-\frac{3}{2}}^n) + \Delta x \Delta t \bar{h}_i^n, & a \geqslant 0, \\ \bar{u}_i^n - c(\bar{u}_{i+1}^n - \bar{u}_i^n) + \dfrac{1}{4}c(1-c)(\Delta \bar{u}_{i+\frac{3}{2}}^n - \Delta \bar{u}_{i-\frac{3}{2}}^n) + \Delta x \Delta t \bar{h}_i^n, & a < 0. \end{cases}
\end{aligned} \tag{6.16}
$$

当然,这种设计方法是非常繁琐的,但是也很容易理解,也非常直观.

Van Leer 采用函数逼近的思想,直接给出了一种线性的"初值函数"的构造

$$
u(x, t_n) = \bar{u}_i^n + \frac{\Delta \bar{u}_i^n}{\Delta x}(x - x_i), \quad x_{i-\frac{1}{2}} \leqslant x < x_{i+\frac{1}{2}}, \tag{6.17}
$$

再利用作为"初值函数",求解初值问题 (6.9) + (6.17),同样得到上述的结果. 但是,上述的线性近似我们并不能看到它的实质和机制. 特别是其中斜率的选择不能说明其好坏和合理性. Van Leer 对于上述格式进行了比较详细的理论分析. 用 Fourier 分析方法,得到格式的 von Neumann 意义下的放大因子

$$
\begin{aligned}
G(k, \Delta t) = 1 &- \frac{1}{2}c(1-c)\left(\frac{1+c}{1-c} - \cos k\Delta x\right)(1 - \cos k\Delta x) \\
&- i\,\frac{1}{2}c(1-c)\left(\frac{3-c}{1-c} - \cos k\Delta x\right)\sin k\Delta x,
\end{aligned} \tag{6.18}
$$

并在一定的假定下得到了它的稳定性、耗散性和色散性的分析结果.

此外, Van Leer 还给出了二阶的"初值函数"的构造形式

$$u(x,t_n)=\bar{u}_i^n+\Delta\bar{u}_i^n\frac{(x-x_i)}{\Delta x}+\frac{1}{2}\Delta^2\bar{u}_i^n\left\{\left(\frac{x-x_i}{\Delta x}\right)^2-\frac{1}{12}\right\},$$

$$x_{i-\frac{1}{2}}\leqslant x<x_{i+\frac{1}{2}} \tag{6.19}$$

同时作了深入的讨论和分析. 特别是对于格式的单调性问题,作者讨论的方案和思想是非常有启发和借鉴意义的.

但是,这种构造从节点模板来讲已经有所扩展,即用到了更多的节点上的积分平均值. 在这一点上,它不如下面介绍的 Collela 等人的 PPM. 而且,采用固定的节点模板,使方法不够灵活,更不能达到格式的优化目的. 从这一点上讲,它和下面的 PPM 方法一样,不如 ENO 方法.

6.3 Collela 和 Woodward 的 PPM

1984 年,Collela 和 Woodward 提出了一种比较简单的二次构造函数方法,称为 PPM. 作者称这种方法比 MUSCL 方法更简单、精确,有处理接触间断问题的更强的能力. 它的优点是不扩展节点模板. 就是说方法仅仅利用左右积分平均值 $\bar{u}_{i-1}^n,\bar{u}_i^n,\bar{u}_{i+1}^n$构造了高阶的"初值函数",达到单调和守恒的要求.

PPM (convection scheme)同样是由积分平均形式构成. 但是它更为简单. 直接给出了(6.12a),即

$$\bar{u}_i^{n+1}=\frac{1}{\Delta x_i}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}u(x,t_{n+1})\mathrm{d}x=\frac{1}{\Delta x_i}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}v(x-c\Delta x)\mathrm{d}x \tag{6.20}$$

中的被积函数 $v(x)$的具体形式. 这就是

$$\begin{aligned}
v(x)&=u_{1,i}+\xi(\Delta u_i+u_{6,i}(1-\xi)),\\
\xi&=\frac{x-x_{i-\frac{1}{2}}}{\Delta x},x_{i-\frac{1}{2}}\leqslant x\leqslant x_{i+\frac{1}{2}},\\
\Delta u_i&=u_{r,i}-u_{1,i},\\
u_{r,i}&=\lim_{x\uparrow x_{i+\frac{1}{2}}}u(x),\\
u_{1,i}&=\lim_{x\downarrow x_{i-\frac{1}{2}}}u(x),\\
u_{6,i}&=6\left(\bar{u}_i^n-\frac{1}{2}(u_{r,i}+u_{1,i})\right).
\end{aligned} \tag{6.21}$$

需要注意的是,在上述表达式中引入的 $u_{r,i},u_{1,i}$,采用了尚未进行积分平均时的左右极限值.

作者在文章中针对 Lagrangian 和 Eulerian 两种不同的二维气体动力学方程组,详细地进行了 PPM 格式的设计和讨论. 有兴趣的读者可以参阅文献[45].

6.4 积分平均格式构造的进一步讨论

根据前面的讨论和分析，我们可以采用多种不同的观念进行积分平均格式的构造.

1. 完全由积分平均后的阶梯函数构造

从我们前面提到的"初值函数"的构造出发，开始由两点组成的节点模板，通过斜率的比较和分析，例如 (6.13) 和 (6.14)，构造控制元 $x_{i-1/2}\leqslant x<x_{i+1/2}$内的线性的"初值函数"

$$u(x,t_n)=N_1(x). \tag{6.22}$$

为了提高构造的"初值函数"的逼近精度，我们可以扩展节点模板：加入 $\bar{u}_{i-2}^n$ 点，构成左三节点模板 $T_l=(\bar{u}_{i-2}^n,\bar{u}_{i-1}^n,\bar{u}_i^n)$，中三节点模板 $T_l=(\bar{u}_{i-1}^n,\bar{u}_i^n,\bar{u}_{i+1}^n)$ 和右三节点模板 $T_l=(\bar{u}_i^n,\bar{u}_{i+1}^n,\bar{u}_{i+2}^n)$. 分别取上述三种节点模板的二阶差商(众所周知，差商与节点的顺序无关!)，我们分别记为 S_{2l}，S_{2c}，S_{2r}. 而后进行类似 (6.13) 的比较和分析，确定单调的四点模板和新的高阶逼近的"初值函数"

$$u(x,t_n)=N_1(x)+S_{\min}(x-x_{\text{new}})(x-x_i). \tag{6.23}$$

2. 直接根据积分平均格式的构造公式

$$\begin{gathered}\bar{u}_i^{n+1}=\bar{u}_i^n-r(\langle a\bar{u}_{i+\frac{1}{2}}\rangle-\langle a\bar{u}_{i-\frac{1}{2}}\rangle)+\Delta x\Delta t\bar{h}_i^n,\ r=\frac{\Delta t}{\Delta x},\\ \langle a\bar{u}_{i\pm\frac{1}{2}}\rangle=\frac{1}{\Delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}}u(x_{i\pm\frac{1}{2}},t)\mathrm{d}t,\end{gathered} \tag{6.24}$$

类似于图 6.3 和 (6.15) (6.16) 式，通过时间积分平均的特征线输运特点，直接构造

$$u(x_{i+\frac{1}{2}},t)=u\left(x_i+\frac{1}{2}\Delta x-a(t-t_n),t_n\right), \tag{6.25}$$

或者不采用特征方法，而采用其他的途径譬如 Roe 的解算子方法等.

事实上，还可以从不同的角度和观点，采用不同间断解分解技巧，设计或构造其他形式的积分平均格式.

3. 直接构造数值流向量的方法

现在考虑一般的标量守恒律方程的 Cauchy 问题

$$u_t+(f(u))_x=0,\ x\in\mathbf{R},t>0, \tag{6.26a}$$

$$u(x,0)=u_0(x), \tag{6.26b}$$

构造差分网格,其空间和时间步长分别记为 $\Delta x,\Delta t$. 我们取积分控制元为 $[x_{i-\frac{1}{2}},x_{i+\frac{1}{2}}]\times[t_n,t_{n+1}]$,对上述方程积分,可得

$$\int_{x_i}^{x_{i+1}}u(x,t_{n+1})\mathrm{d}x=\int_{x_i}^{x_{i+1}}u(x,t_n)\mathrm{d}x$$
$$-\int_{t_n}^{t_{n+1}}\left[f(u(x_{i+\frac{1}{2}},t))-f(u(x_{i-\frac{1}{2}},t))\right]\mathrm{d}t. \tag{6.27}$$

根据积分平均的定义,我们有

$$\bar{u}_i^{n+1}=\bar{u}_i^n-\frac{\Delta t}{\Delta x}(h_{i+\frac{1}{2}}-h_{i-\frac{1}{2}}), \tag{6.28}$$

其中

$$h_{i+\frac{1}{2}}=\langle f(u(x_{i+\frac{1}{2}},t))\rangle=\frac{1}{\Delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}}f(u_{i+\frac{1}{2}}(t))\mathrm{d}t \tag{6.29a}$$

为时间平均数值流通量,它是原流通量的时间积分平均,而未知函数 $u(x,t)$ 又必须是阶梯函数 $\{\bar{u}_i\}$ 的某种插值逼近. 从而格式设计的关键,就在于时间平均的数值逼近方案.

利用(6.25)式,同样的可以改写(6.29a)为

$$\langle f(u(x_{i+\frac{1}{2}},t))\rangle=\frac{1}{\Delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}}f\left(u\left(x_i+\frac{1}{2}\Delta x-a(t-t_n),t_n\right)\right)\mathrm{d}t . \tag{6.29b}$$

于是,我们很可以采用数值积分的方法,对上面的时间区间积分构造一种格式,譬如梯形公式、Gauss 积分公式,等等. 但是,请不要忘记

$$u(x_{i+\frac{1}{2}},t)=u\left(x_i+\frac{1}{2}\Delta x-a(t-t_n),t_n\right)$$

仍然应该由阶梯函数 $\{\bar{u}_i\}$ 的某种插值逼近得到. 这样生成的积分平均型格式,也会有同样的效果.

练习题

1. 对于简单的对流方程和分段常数积分平均分布(6.9~6.10),根据(6.12)的积分形式,试设计一种 upwind 型的积分平均格式.
2. 如果取跨三个时间层的积分控制元 $[x_{i-1},x_{i+1}]\times[t_{n-1},t_{n+1}]$,试利用类似的积分形式,构造三层的积分平均格式.
3. 利用直接构造数值流向量的方法,对于标量守恒律初值问题(6.26),根据(6.29a)积分关系,试采用 Gauss 数值积分方法构造一种积分平均型格式.

三、高分辨率方法篇

Harten 于 1983 年在重要期刊 J. Computational Physics 上发表了题目为 "High Resolution Schemes for Hyperbolic Conservation Laws"的著名论文[89]. 第一次提出了"高分辨率(high resolution)方法"、TVD(total variation diminishing)概念和运用限制函数或限制器(limiter)的技术. 为数值方法,特别是差分方法的理论和构造,开拓了一个崭新的方向. 不管它未来的发展前景如何,该文的意义是深远的,对数值方法发展的影响也是伟大的,Harten 本人功不可没.

所谓"高分辨率",意指数值解图形的锐利和逼真,表明数值方法的数值耗散微弱而适中. 事实上,从这个意义上来说,前面一章里介绍的几种基于 Riemann 问题的方法,也算是"高分辨率"方法.

从下一章开始,我们将讨论所谓的高分辨率方法,特别是由 Harten 为首所创立的 TVD、ENO 和 weighted ENO 等方法.

第七章 TVD 方法的构造和控制函数[75,91]

在第二章和其后的几章,我们已经或多或少地涉及到了有关 TVD 方法的某些概念和思想,所以现在讨论起来就要顺畅的多.

首先回顾第二章的 TVD 的定义,对于一般的守恒律方程

$$U_t + f(U)_x = 0, \quad A = \frac{\partial f(U)}{\partial U}, \tag{7.1}$$

$$U = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_m \end{pmatrix}, \quad f(U) = \begin{pmatrix} f_1(u_1, u_2, \cdots, u_m) \\ f_2(u_1, u_2, \cdots, u_m) \\ \vdots \\ f_m(u_1, u_2, \cdots, u_m) \end{pmatrix}, \tag{7.2}$$

它的一个差分格式

$$U_i^{n+1} = U_i^n - r(\tilde{f}_{i+\frac{1}{2}} - \tilde{f}_{i-\frac{1}{2}}), \quad r = \frac{\Delta t}{\Delta x}, \tag{7.3}$$

其中,$\tilde{f}_{i\pm\frac{1}{2}}$称为数值流向量(numerical flux),

$$\tilde{f}_{i+1/2} = \tilde{f}(U_{i-l}, \cdots U_{i+k}), \quad k, l \geqslant 0. \tag{7.4}$$

而且,它应当满足 Lipschitz 连续性条件和相容性条件

$$\bar{f}(U,\cdots,U) = f(U). \tag{7.5}$$

对于标量方程,说它是 TVD 的,如果满足条件

$$\mathrm{TV}(U^{n+1}) \leqslant \mathrm{TV}(U^n), \tag{7.6}$$

其中

$$\mathrm{TV}(U^n) = \Delta x \sum_i |\delta U_{i+1/2}|, \tag{7.7}$$

这里 $\delta u_{i+1/2} = u_{i+1} - u_i$. 对一般情况有第二章介绍的 Harten 引理,即若将格式写成

$$U_i^{n+1} = U_i^n - C_{i-1/2}\delta U_{i-1/2} + D_{i+1/2}\delta U_{i+1/2}, \tag{7.8}$$

条件

$$\begin{cases} C_{i+1/2} \geqslant 0, \quad D_{i+1/2} \geqslant 0, \\ 0 \leqslant C_{i+1/2} + D_{i+1/2} \leqslant 1 \end{cases} \tag{7.9}$$

是格式为 TVD 的一个充分条件.

7.1　从 Lax-Wendroff 格式谈起

我们已经讨论过简单对流方程

$$u_t + au_x = 0, \quad a = \mathrm{const} > 0 \tag{7.10}$$

的 Lax-Wendroff 格式

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{c}{2}(u_{i+1}^n - u_{i-1}^n) + \frac{c^2}{2}(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n). \tag{7.11}$$

如果将它改写为数值流向量的形式,即为

$$u_i^{n+1} = u_i^n - r(\bar{f}_{i+\frac{1}{2}} - \bar{f}_{i-\frac{1}{2}}), \quad r = \frac{\Delta t}{\Delta x}, \tag{7.12}$$

其中

$$\bar{f}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(au_{i+1}^n + au_i^n - ra^2(u_{i+1}^n - u_i^n)). \tag{7.13}$$

在第二章里我们说过它不是单调格式,因为它作为线性格式形式是

$$u_i^{n+1} = \frac{c(c-1)}{2}u_{i-1}^n + (1-c^2)u_i^n + \frac{c(c+1)}{2}u_{i+1}^n, \tag{7.14}$$

其右端的第一项系数仅当 Courant 数 $c = a\Delta t/\Delta x > 1$ ($a > 0$)时才可能为正,而这又是格式稳定性条件所不能允许的,因而不满足单调性的定义.

对于标量守恒律方程而言,Crandall 和 Majda[58] 证明了单调格式保证了 TVD 性质,文献[251]也证明了 TVD 格式保持解的单调性.

在第三章里我们已经看到,正是因为它的非单调问题,或者说色散优势的缺点,Lax-Wendroff 格式容易在间断、大梯度附近产生虚假振荡,呈现非线性

不稳定现象.但是,Lax-Wendroff 格式是全二阶格式,这是人们所常常追求的.在比较平滑的区域,它的应用效果是相当理想的.

如果将格式写在流向量的形式,它的数值流向量即为(7.13)式.可是如果按照 Riemann 问题的第四章定理 4.1 的(4.43)形式,或者第五章的 Roe 形式(5.6)式,其数值流向量却应该是

$$\tilde{f}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(au_{i+1}^n + au_i^n - |a|(u_{i+1}^n - u_i^n)). \tag{7.15}$$

显然,这种形式构成的格式仅为一阶的,事实上它是强耗散的 Lax 格式,其应用效果和弱点在第三节已经清楚.两者的差别仅仅在于,数值流量(7.13)和(7.15)式的变差项$[u_{i+1/2}] = u_{i+1} - u_i$ 前的系数不同,分别为 ra^2 和$|a|$而已.可是这种差别含义很深,因为它依赖于步长比 r,可以利用步长比的改变,对格式的数值色散和耗散进行可能的和有限的调节.可以设想如果取变差项的系数是一种函数,既能够保证格式的单调和 TVD 性质,又可以具有自适应的数值色散和耗散的调节功能,那就十分理想了.

7.2 TVD格式的构造和讨论

1. Lax-Wendroff 格式的推广和改造

考虑标量守恒方程

$$\begin{aligned} &u_t + (f(u))_x = 0, \quad x \in R, \quad t > 0, \\ &a = a(u) = \partial f(u)/\partial u, \end{aligned} \tag{7.16}$$

其 Lax-Wendroff 格式是

$$u_i^{n+1} = u_i^n - r\left(\tilde{f}_{i+\frac{1}{2}} - \tilde{f}_{i-\frac{1}{2}}\right), \tag{7.17}$$

其数值流向量为

$$\tilde{f}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(f_i^n + f_{i+1}^n - ra_{i+1/2}(f_{i+1}^n - f_i^n)). \tag{7.18}$$

它是二阶方法,但不是单调,也不是 TVD 的.类似地,如果采用 Riemann 问题的间断解形式的(4.43),或者采用 Roe 形式(5.6)式,得到的结果却是

$$\tilde{f}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(f_i^n + f_{i+1}^n - |a_{i+1/2}|(u_{i+1}^n - u_i^n)). \tag{7.19}$$

同前面对于单向波模型方程的讨论一样,它也只是一阶方法.

我们希望能够构造一种格式,既不降低 Lax-Wendroff 格式的精度,同时又能够保单调或者 TVD 性质.根据数值流向量的基本特征,对于数值流向量的设计,提出如下形式的数值流量

$$\bar{f}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\left(f_i^n + f_{i+1}^n - \frac{1}{r}\varphi(ra_{i+1/2})(u_{i+1}^n - u_i^n)\right), \tag{7.20}$$

其中

$$\varphi(x) = \varphi(x,\theta) \tag{7.21}$$

及

$$\theta = (u_i - u_{i-1})/(u_{i+1} - u_i). \tag{7.22}$$

而且,一般取

$$a_{i+\frac{1}{2}} = \begin{cases} \dfrac{[f]_{i+\frac{1}{2}}}{[u]_{i+\frac{1}{2}}} = \dfrac{f(u_{i+1}) - f(u_i)}{u_{i+1} - u_i}, & [u]_{i+\frac{1}{2}} \neq 0, \\ a\left(u_{i+\frac{1}{2}}\right), & [u]_{i+\frac{1}{2}} = 0, \end{cases} \tag{7.23}$$

称为数值流量的限制函数或限制器(limiter).除了 Jacobi 阵外,它还依赖于时间和空间的网格步长比 r 和 $x = x_{i+1/2}$点附近的变差比 θ.利用它们的这种变差比,实现对数值色散和数值耗散的监控和自适应调节.

于是,对于这种形式 TVD 格式的设计和构造,我们的工作就是如何提出一种合理的、有效的限制函数.首先不考虑含有变差比的简单情况.应隆安和滕振寰[251]给出了下面的定理

定理 7.1 若限制函数(7.21)满足条件

$$|x| \leqslant \varphi(x) \leqslant 1,\text{当 } 0 \leqslant |x| \leqslant \mu \leqslant 1, \tag{7.24}$$

则在 CFL 条件下,即

$$r \max_i \left|a_{i+\frac{1}{2}}^n\right| \leqslant \mu, \tag{7.25}$$

格式(7.20) 是 TVD 的.

显而易见,$\varphi(x) = |x|$是 upwind 格式;而 $\varphi(x) = x^2$ 则是 Lax-Wendroff 格式.Harten 为了使这种形式的 TVD 格式能够与弱解的熵条件相容,提出了一种分段函数形式的限制函数

$$\varphi(x) = \begin{cases} |x|, & |x| \geqslant \delta, \\ \dfrac{x^2 + \delta^2}{2\delta}, & |x| < \delta, \end{cases} \tag{7.26}$$

δ 是一个小量.

2. 积分平均型的流向量设计

取积分控制元为$\left[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}\right] \times [t_n, t_{n+1}]$,对上述方程积分

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u(x, t_{n+1})\mathrm{d}x = \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u(x, t_n)\mathrm{d}x - \int_{t_n}^{t_{n+1}}\left[f\left(u\left(x_{i+\frac{1}{2}}, t\right) - f\left(u\left(x_{i-\frac{1}{2}}, t\right)\right)\right)\right]\mathrm{d}t. \tag{7.27}$$

根据积分平均的定义,我们有

$$\bar{u}_i^{n+1} = \bar{u}_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(h_{i+\frac{1}{2}} - h_{i-\frac{1}{2}}\right), \tag{7.28}$$

其中

$$h_{i+\frac{1}{2}} = < f\,(u(x_{i+\frac{1}{2}},t)) > = \frac{1}{\Delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}} f\,(u_{i+\frac{1}{2}}(t))\mathrm{d}t, \tag{7.29}$$

在第六章我们称它为时间平均数值流通量,它是原流通量的时间积分平均.同样地,我们必须要求时间步长 Δt 满足 CFL 条件 $c = a\Delta t/\Delta x < 1$,以便保证特征线的依赖域不超越当前的 Riemann 问题区间.这种积分平均方法我们在第六章已经作过讨论,它的关键在于被积函数 $v_{,m}(x)$ 和流通量函数 $f\,(u_{i+1/2})$ 的重构,或者积分的转换.详细的内容不必赘述.

3. 数值积分的构造方法

利用(7.27)的积分形式,如果取梯形积分近似,我们可以得到非积分平均形式的流向量形式.显式为

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(f\,(u_{i-\frac{1}{2}}^n) - f\,(u_{i-\frac{1}{2}}^n)), \tag{7.30}$$

隐式为

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}\left(\frac{f\,\left(u_{i+\frac{1}{2}}^n\right) + f\left(u_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}\right)}{2} - \frac{f\,\left(u_{i-\frac{1}{2}}^n\right) + f\,\left(u_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}\right)}{2}\right), \tag{7.31}$$

问题是上述的流量函数如何给定.一般地,对于显式可以写成

$$\bar{f}_{i+\frac{1}{2}} = f\,(u_{i-\frac{1}{2}}^n) = f\,(u_{i+\frac{1}{2}}^-, u_{i+\frac{1}{2}}^+), \tag{7.32}$$

其中 $\left(u_{i+\frac{1}{2}}^-, u_{i+\frac{1}{2}}^+\right)$,最简单的情况是取 Riemann 间断分解点 $x_{i+1/2}$ 的两侧节点上的函数值

$$u_{i+\frac{1}{2}}^- = u_i^n, \quad u_{i+\frac{1}{2}}^+ = u_{i-1}^n. \tag{7.33}$$

一种比较常用的简单形式是

$$\begin{aligned} u_{i+\frac{1}{2}}^- &= u_i + \frac{1}{2}\min\bmod(u_{i+1} - u_i, u_i - u_{i-1}), \\ u_{i+\frac{1}{2}}^+ &= u_{i+1} - \frac{1}{2}\min\bmod(u_{i+2} - u_{i-1}, u_{i+1} - u_i), \end{aligned} \tag{7.34}$$

这里

$$\min\bmod(x,y) = \frac{\mathrm{sgn}(x) + \mathrm{sgn}(y)}{2}\min(|x|, |y|),$$

$$\operatorname{sgn}(x)=\begin{cases}1, & x \geqslant 0, \\ -1, & x<0,\end{cases} \tag{7.35}$$

或者

$$\min \bmod(x, y)=\operatorname{sgn}(x) \cdot \max\{0, \min[|x|, y \operatorname{sgn}(x)]\}. \tag{7.36}$$

如果取算术平均的数值流通量

$$\tilde{f}_{i+\frac{1}{2}}=f\left(\left(u_{i+\frac{1}{2}}^{-}+u_{i+\frac{1}{2}}^{+}\right)/2\right), \tag{7.37}$$

也是在实际计算中常常可行的方法.当然,这种简单的格式无疑是一阶的.

如果仅仅考虑一阶精度,我们就无须局限对数值流向量函数的取值.譬如,取数值流量为

$$\tilde{f}(u)=f\left(u^{-}, u^{+}\right)=\begin{cases}\min_{u^{-} \leqslant u \leqslant u^{+}} f(u), & u^{-} \leqslant u^{+}, \\ \max_{u^{-} \geqslant u \geqslant u^{+}} f(u), & u^{-}>u^{+},\end{cases} \tag{7.38}$$

其中(u^{-}, u^{+})最简单的可以是间断分解点 $x_{i+1/2}$左右节点函数值(7.33),也可以是(7.34).这就是著名的 Godunov 格式,它是单调和 TVD 的.

所谓的 Engquist-Osher 格式[67]也是单调、迎风和 TVD 的,其中

$$\begin{aligned}\tilde{f}&=f\left(u^{-}, u^{+}\right) \\ &=\int_{0}^{u^{+}} \max \left(f^{\prime}(s), 0\right) \mathrm{d} s+\int_{0}^{u^{-}} \min \left(f^{\prime}(s), 0\right) \mathrm{d} s+f(0).\end{aligned} \tag{7.39}$$

上述的方法仅仅是一阶的,即使在光滑的区域内也是一样. 更主要的是,上述方法没有调节数值色散和数值耗散的自适应功能.

事实上,真正精确的数值流向量的设计和构造,根据(7.32)式,其关键在于间断点 $x_{i+1/2}$处左右函数值$(u_{i+1/2}^{+}, u_{i+1/2}^{-})$的给定方式和精度.这一观点将是我们今后许多重要的间断解数值方法构造和设计的关键.如该节的 TVD、而后将介绍的 ENO、weighted ENO、有限体积法(FVM)和间断 Galerkin 有限元方法(DGFEM)等等.

以右函数值 $u_{i+1/2}^{+}$为例,为了构造它必须讨论节点模板选择问题.当然节点的多少决定着精度的阶次.一般可以表示为

$$u_{i+1/2}^{+}=\phi\left(\bar{u}_{i-l}^{n}, \cdots, \bar{u}_{i+1}^{n}, \cdots, \bar{u}_{i+k}^{n}\right),$$

而且,因为它是间断点 $x_{i+1/2}$右侧的函数值,构造它的插值"基点"应当是间断点 $x_{i+1/2}$右侧的第一个节点函数值 u_{i+1}^{n},在积分平均的情况下是 $\bar{u}_{i+1}^{n}$.由此开始,根据精度的要求,先右后左的逐次扩展插值的节点模板.因而一般情况是 $k>l$. 节点的添加,还需要有一种规则.在第八章里将介绍的 ENO 和 weighted ENO 方法,采用的是差商模值极小化过程.可以说是第六章中的斜率值的极小比较方法的推广.

4. 高阶 TVD 格式的设计

设计和构造高阶的数值流量是我们所追求的目标，对此在第六章已经有所接触，在今后的许多章节里，它将是我们始终要讨论和介绍的．例如 ENO 和 weighted ENO，以及有限体积法和间断 Galerkin 方法等．能够直接构造高阶的数值流向量自然很好，但不容易．其实我们完全可以采用改造和改进的方法，在低阶的流向量 $\tilde{f}_{i+1/2}$基础上，通过适当的数值耗散和数值色散的调节，即第三章所介绍的余项补偿方法，以提高方法的阶次．通常人们所说的采用反扩散(anti-diffusion)技术，生成新的复合的数值流通量(anti-diffusive flux) $h_{i+1/2}$．实质上，这就是 Boris 和 Book 提出的流通量矫正迁移(flux correction transport)方法[19]．一般形式可以表示为

$$h_{i+\frac{1}{2}}=\tilde{f}_{i+\frac{1}{2}}+\varepsilon(\Delta x,u;i),\tag{7.40}$$

其中 $\varepsilon(\Delta x,u;i)$是流通量的反扩散矫正项．具体实现也可以采用多步过程．其实在第三节里关于数值方法的补偿改造我们已经详细作了介绍，不再重复．

另一种途径是利用已有低阶单调数值流向量 $\tilde{f}^{l}_{i+1/2}$和一个高阶数值流向量 $\tilde{f}^{h}_{i+1/2}$进行矫正

$$h_{i+\frac{1}{2}}=\tilde{f}^{l}_{i+\frac{1}{2}}+\varphi(\theta)\left[\tilde{f}^{h}_{i+\frac{1}{2}}-\tilde{f}^{l}_{i+\frac{1}{2}}\right].\tag{7.41}$$

利用 θ 的数值大小和符号的变化，鉴别和判断解的大梯度和激波的发展，同时控制反扩散的强度，以达到适时的调节．

事实上，三节点模板所能够构造的高阶数值流向量格式，只能达到一阶的精度，所以上述的(7.40～7.41)形式必然将节点模板扩展到五点以上．例如，在第三章中，利用余项补偿方法得到的(3.43～44)式．

Harten 提出的二阶 TVD 格式中，引入了一个辅助函数 g，令数值流量为

$$h_{i+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}\left(\tilde{f}^{n}_{i}+\tilde{f}^{n}_{i+1}-\frac{1}{r}\varphi\left(r\alpha_{i+1/2}\right)\left(u^{n}_{i+1}-u^{n}_{i}\right)\right),\tag{7.42}$$

其中

$$\tilde{f}_{i}=f(u_{i})+g_{i},\alpha_{i+\frac{1}{2}}=a_{i+\frac{1}{2}}+\gamma_{i+\frac{1}{2}},$$

$$g_{i}=\min\bmod\left\{\sigma_{i+\frac{1}{2}}\left[u_{i-\frac{1}{2}}\right],\sigma_{i-\frac{1}{2}}\left[u_{i-\frac{1}{2}}\right]\right\},$$

$$\gamma_{i+\frac{1}{2}}=\begin{cases}\dfrac{[g_{i+1/2}]}{[u_{i+1/2}]},&[u_{i+1/2}]\neq 0,\\0,&[u_{i+1/2}]=0,\end{cases}$$

$$\sigma(z)=\frac{1}{2}\left[\varphi(z)-rz^{2}\right],$$

$$\varphi(z)=|z|. \tag{7.43}$$

在这里引入了辅助通量 $g_i=g(u_{i-1},u_i,u_{i+1})$，因而数值流向量依赖的节点不再是两个，而是四个

$$h_{i+1/2}=g(u_{i-1},u_i,u_{i+1},u_{i+2}),$$

这就是说格式的节点模板已经扩展为 $(u_{i-2},u_{i-1},u_i,u_{i+1},u_{i+2})$.

对于隐式(7.31)，又可以写为

$$u_i^{n+1}+\frac{r}{2}\left(f\left(u_{i+\frac{1}{2}}^{n+1}\right)-f\left(u_{i-\frac{1}{2}}^{n+1}\right)\right)=u_i^n-\frac{r}{2}\left(f\left(u_{i+\frac{1}{2}}^{n}\right)-f\left(u_{i-\frac{1}{2}}^{n}\right)\right), \tag{7.44}$$

同样是流函数的数值逼近，即数值流向量的形式问题，归根到底，还是中间格点函数值 $\{u_{i+1/2}\}$ 的重构问题. 特别是自适应的数值流向量的构造问题.

虽然人们常常追求高阶的格式是成功的，但是一般的方法也仅仅是在光滑区域才能够达到，事实上在间断附近这种希望多半会落空的. 尤其对于TVD格式而言，有下面的定理.

定理 7.2 所有的TVD格式在函数的极值点附近要降至一阶精度.

7.3 限制函数或限制器的简单讨论[89,75,223]

采用限制函数，进行数值方法的数值耗散性和色散性效应调节和控制，是构造高分辨率格式，或者无振荡格式的重要手段. 自从 Van Leer 引入流量限制函数得到高分辨率无振荡格式以来，为实现数值耗散效应，色散效应和数值群速度效应的适时调节，特别是保持方法的TVD和满足熵条件，限制函数合理的构造和选择，以及插入方式，逐渐成为一个十分瞩目的研究课题.

Roe，Chakravarthy 和 Osher[30]，Sweby[217]和 Jameson[112]等等，他们分别对于 Riemann 问题的 Roe 型方法、TVD 和 ENO 方法和有限体积方法，以及不同的数值模拟问题，提出了各种形式的限制函数. 而且，也有大量的文献主要进行限制函数的性质、功能和比较研究. 最近十几年来，有关限制函数的文献数不胜数，仅仅就简单的单向波模型方程的分析，读者可以去查看 Toro 的专著[223]，那里就用相当长的篇幅进行了详细的讨论.

以前面所介绍的 TVD 格式(7.20～21)而言，限制函数的构造和插入方式也可以不尽相同.

例如，对于简单的模型方程(7.10)，Lax-Wendroff 格式又可以写成upwind 格式加上一个所谓的反扩散项，事实上是通过余项调节减小 upwind 格式的数值耗散强度

$$u_i^{n+1} = u_i^n - c(u_i^n - u_{i-1}^n) - \frac{c(1-c)}{2}(u_{i+1}^n - 2u_i^n + u_{i-1}^n). \quad (7.45)$$

Sweby 设计它的加限制器格式为

$$u_i^{n+1} = u_i^n - c(u_i^n - u_{i-1}^n)\left\{1 + \frac{(1-c)}{2}\left(\frac{\varphi(r_{i+\frac{1}{2}})}{r_{i+\frac{1}{2}}} - \varphi(r_{i-\frac{1}{2}})\right)\right\}, \quad (7.46)$$

其中

$$r_{i+\frac{1}{2}} = \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{u_{i+1}^n - u_i^n}. \quad (7.47)$$

这种格式是 TVD 的充分条件是

$$-\frac{2}{1-c} \leqslant \frac{\varphi(r_{i+\frac{1}{2}})}{r_{i+\frac{1}{2}}} - \varphi(r_{i-\frac{1}{2}}) \leqslant \frac{2}{c}. \quad (7.48a)$$

如果考虑到 Courant 数条件($0 \leqslant c \leqslant 1$),即

$$\left|\frac{\varphi(r_{i+\frac{1}{2}})}{r_{i+\frac{1}{2}}} - \varphi(r_{i-\frac{1}{2}})\right| \leqslant 2. \quad (7.48b)$$

又例如,第六章的 MUSCL 格式(6.16)式,在 $a>0$ 情况下,可以取为

$$\bar{u}_i^{n+1} = \bar{u}_i^n - c(\bar{u}_i^n - \bar{u}_{i-1}^n) + \frac{1}{4}a\Delta x(1-c)(\varphi(\theta_i)\bar{S}_{i+\frac{1}{2}}^n - \varphi(\theta_{i-1})\bar{S}_{i-\frac{3}{2}}^n) + \Delta x\Delta t\bar{h}_i^n, \quad (7.49)$$

其中

$$\phi(\theta_i^n) = \max(0, \min(1.0, 2\theta_i^n), \min(2.0, \theta_i^n)),$$
$$\theta_i^n = \frac{[u]_{i-\frac{1}{2}}^n}{[u]_{i+\frac{1}{2}}^n} = \frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{u_{i+1}^n - u_i^n}, \quad (7.50)$$

是所谓的 supperbee limiter,它已经很成功地应用于运动界面的追踪问题,而且其效果十分理想.

对于 Riemann 间断分解问题的数值流向量(4.43),或者 Roe 的参向量展开形式的数值流向量(5.6),通常是在变差项中插入限制函数.特别是后者

$$\tilde{f}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\left(f_i + f_{i+1} - \sum_{k=1}^{m}\tilde{a}_k\varphi(\theta_i)|\tilde{\lambda}_k|\tilde{e}_k\right). \quad (7.51)$$

对于一般的守恒律问题,Sweby 提出的 TVD 方法,其数值流向量插入的限制函数形式比较复杂

$$\tilde{f}_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\{f_i^n + f_{i+1}^n$$

$$- a_{i+1/2}\left(1 - \varphi(\theta_i)(1 - r a_{i+1/2})\right)(u_{i+1}^n - u_i^n) \Big| , \qquad (7.52)$$

欲使格式是 TVD 的，根据(7.8～7.9)的要求可以证明限制函数应当满足条件

$$0 \leqslant \left(\varphi(\theta), \frac{\varphi(\theta)}{\theta}\right) \leqslant 2. \qquad (7.53)$$

下面给出一些经常采用的重要的限制函数，有关的讨论和分析可以参看文献[30,75,223,217].

1. Van Leer 限制函数

$$\varphi(\theta) = \frac{\theta + |\theta|}{1 + |\theta|}. \qquad (7.54)$$

2. Roe-Sweby 限制函数

$$\varphi(\theta) = \max\{0, \min(\delta\theta, 1), \min(\theta, \delta)\}, \quad 1 \leqslant \theta \leqslant 2 \qquad (7.55)$$

若 $\delta = 2$，即为前面采用的比较平稳的 supperbee 限制函数. 在很多分析文献中，比较首肯这种形式. 若 $\delta = 1$，即为 Roe 的 minmod 限制函数.

3. Supperbee 或者 Chakravarthy-Osher 限制函数

$$\varphi(\theta) = \max\{0, \min(2\theta, 1), \min(\theta, 2)\}. \qquad (7.56)$$

在一般的 TVD 格式形式下，每一种限制函数的图形都有其相应的 TVD 域. 可以参见付德薰的专著[75].

7.4　几点注释

1. 关于 TVB 格式

Shu 于 1987 年提出总变差有界(total variation bounded)格式的概念和思想[197]，即如果存在 $B = B(u_0(x)) > 0$，使得

$$\mathrm{TV}(u^n) \leqslant B, \forall n, \Delta t, n\Delta t \leqslant T, \qquad (7.57)$$

显然 TVD 格式必是 TVB 的. 作者还具体地指出如何改造某些已知的二阶 TVD 格式为 TVB 格式.

这种格式并不要求时间层间变差的不增约束，更着眼于总体的变差的有界，无疑使格式的设计和构造，以及理论上的讨论变得更简便和直接.

由于本书篇幅的限制，不可能对于限制函数的理论和各种不同的形式，及其插入方式做更详细的讨论.

但是,在今后的有关的章节,我们还会介绍不同的限制方式和插入方式.

TVD 方法是以高分辨率的思想方法提出来的,就是说在当时人们认为高分辨率,或者说得到数值解的锐利(sharp)、逼真图象为根本目标.但是,事实是:单调、TVD、限制函数和高分辨率的设计思想,并不能够完全地包涵人们对于数值解的要求.因为纵然能够得到高分辨率的图形,其中常常不可避免存在微小的虚假振荡,何况含有虚假振荡的解也算不上是真正的高分辨率.

在第三章里我们已经讨论了数值方法的数值耗散和色散效应.大家知道,要求数值解的高分辨率的设计思想,显然应当在格式的设计尽可能地减弱数值耗散性,甚至完全消除数值耗散效用.这样做的结果,又可能忽略了数值色散的群速度和相速度效用.而后者就是产生和隐含虚假振荡的机制.因此,以 Harten 为首的数值数学家们,在不久就注意和开始强调无振荡(non-oscillatory)和本质无振荡(essentially non-oscillatory)的本质问题.这将是我们下一章所讨论的内容.

2. 关于格式的精度

直至现在,我们所介绍的格式的精度不会很高,其关键在于,被用来构造格式的节点,或者单元的模板是很小的,尤其是 Riemann 问题方法、Roe 参向量解算子和 TVD 类方法.因为它们所赖于构建的网格节点个数,或者积分控制元个数在 2 至 3 个,能够构造的逼近多项式不会超过 2 阶.如果考虑到适当的自适应调节,譬如引入限制函数等等.所以总体精度也只能低于两阶.即使你使尽混身解数,玩出花儿来,窄小的“舞台”也终究出不了好戏.因此我们不可抱有在此基础上构造高阶格式的幻想.

为了构造高阶精度的格式,惟有扩展节点模板,增加节点的个数,或者说增加控制元的范围即单元模板的个数.但是,又面临新的矛盾,因为用这样扩展的节点模板,构造的更高阶逼近多项式,常常又引入了新的极值而加强了数值解的振荡机制,反而得不偿失.

既可以扩展节点模板,又能够尽可能地减少引入数值解的振荡机制,这是可能的.在 Van Leer 构造 MUSCL 格式和 Collela 等提出 PPM 中,我们已经看到他们的有效措施,通过减小 Newton 插值逼近多项式的各阶差商模值的幅度,达到减弱振荡的效果.尤其是 90 年代所发展的 ENO 和 weighted ENO 方法,更为完满地解决了这个困难.

练习题

1. 以简单的单行波方程为例，对于它的 upwind 格式(2.8)式、Beam-Warming 格式(3.9)、MacCormack 格式(3.41)和 Moretti 的 λ - 格式(3.57)，改写为数值流量形式.
2. 利用(7.9)的条件，讨论单行波方程的 Lax，Lax-Wendroff 格式是否满足 TVD 条件.
3. 采用第六章的 Van Leer 方法，构造(7.29)的数值流通量.
4. 对于激波模型方程，给定初值条件[5]和周期为 2 的边条件
$$u(x,0) = u_0(x) = 0.25 + 0.5\sin(\pi x) \tag{1.15}$$
采用(7.32)和(7.34)的数值流通量，算到 $T=1.1$.
5. 利用方波碰撞实验，对于数值流通量插入不同的限制函数，分析它们的不同效果.
6. 对于 Sod 的激波管问题，采用 Roe 的方法，并引入介绍的几种限制函数，进行数值试验. 根据数值结果，分析限制函数的效果.

第八章 ENO 和 weighted ENO 方法

1986 年 Harten[93]提出了无振荡格式(non-oscillatory)的概念和思想. 来年，他和 Engquist，Osher 和 Chakravathy 等人提出了本质无振荡(essentially non-oscillatory)格式的方案和方法[93~97]，文献[97]完整而系统地讨论和研究了这种方法的基本结构、步骤和理论. 由于本文开创性的历史意义，1997 年美国举世闻名的 J. Comput. Phys. 杂志为了纪念其 30 周年而出版的纪念文集中，再次重新发表了全文，Shu 为此写了专门的纪念文章[204]. 可以说，ENO 方法的创立，在守恒律方程(组)的高阶和高分辨率数值方法的设计上，找到了一种比较统一而有效的途径.

ENO 方法采用了逐次扩展的节点模板，根据各阶差商的绝对值极小选择方式，提高插值方法精度而实现高分辨率和无振荡的效果. 但是，方法的实施过程中，有许多中间计算结果被可惜的丢弃不用. 1994 年的文献[149]，提出了 weighted ENO 方案，将这个不足作了弥补，因此得到了更为广泛的应用[203,205].

8.1 一维标量方程的 ENO 和 weighted ENO 格式

考虑一维标量守恒律组

$$u_t + (f(u))_x = 0 \quad x \in (a,b), t > 0, \tag{8.1}$$

$$u(x,0) = u^0(x) \quad x \in [a,b]. \tag{8.2}$$

设网格剖分为

$$a = x_{\frac{1}{2}} < x_{\frac{3}{2}} < \cdots < x_{N-\frac{1}{2}} < x_{N+\frac{1}{2}} = b, \tag{8.3}$$

单元 $I_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$，单元中点为 $x_i = (x_{i-1/2} + x_{i+1/2})/2$，步长为 $\Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}, i = 1,2,\cdots,N$. 定义

$$\Delta x = \max_{1 \leqslant i \leqslant N} \Delta x_i.$$

如同前面对 TVD 方法的讨论那样，ENO 或者 weighted ENO 方法的具体构造又有两种不同的观点，其一是积分平均型的格式，或称为有限体积型的 ENO 方法；另一种是有限差分型的 ENO 方法.

1. 积分平均型格式或者有限体积型格式

将原方程在区间 I_i 上积分，并整理得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u(x,t)\mathrm{d}x + f(u(x_{i+\frac{1}{2}},t)) - f(u(x_{i-\frac{1}{2}},t)) = 0. \tag{8.4}$$

定义函数 $u(x,t)$ 的单元平均值

$$\bar{u}_i(t) = \frac{1}{\Delta x_i}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} u(x,t)\mathrm{d}x, \tag{8.5}$$

则有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{u}_i + \frac{1}{\Delta x_i}\left[f(u(x_{i+\frac{1}{2}},t)) - f(u(x_{i-\frac{1}{2}},t))\right] = 0, \tag{8.6}$$

这里由于只有单元平均值已知，所以需要构造函数在单元边界点（半网格节点）上的值 $u_{i+1/2}, i = 0,1,\cdots,N$. 此时有限体积格式可写为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{u}_i + \frac{1}{\Delta x_i}\left[f(u_{i+\frac{1}{2}}) - f(u_{i-\frac{1}{2}})\right] = 0. \tag{8.7}$$

假定周期边界条件，即假定在计算区域外的数值解是可以得到的（这也适合于具有紧致支集的问题）. 对于一致网格剖分 $\Delta x_i = \Delta x$，我们可以如下构造单元节点上的函数值：

(1)取定一个模板.

例如可以取包括三个单元的模板，例如 $S = \{I_{i-1}, I_i, I_{i+1}\}$.

(2)构造一个多项式，设为 $p(x)$，使其满足

$$\frac{1}{\Delta x}\int_{x_{j-\frac{1}{2}}}^{x_{j+\frac{1}{2}}} p(x)\mathrm{d}x = \bar{u}_j, \quad j = i-1, i, i+1 \tag{8.8}$$

在所选择的模板上成立. 上述模板下多项式 $p(x)$ 是惟一确定的不超过二次

的多项式.设

$$p(x) = \hat{p}(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2, \xi = \frac{x - x_i}{\Delta x_i}, \tag{8.9}$$

现在的情况是 $j = i-1, i, i+1$. 由(8.8)式得

$$\begin{aligned} j = i-1: & a_0 - a_1 + \frac{26}{24}a_2 = \bar{u}_i, \\ j = i: & \quad a_0 + \frac{1}{12}a_2 = \bar{u}_{i-1}, \\ j = i+1: & a_0 + a_1 + \frac{26}{24}a_2 = \bar{u}_{i+1}. \end{aligned} \tag{8.10}$$

解之,可得

$$a_0 = \bar{u}_i - \frac{1}{24}\delta^2\bar{u}_i, a_1 = \frac{1}{2}(\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_{i-1}), a_2 = \frac{1}{2}\delta^2\bar{u}_i$$

$$\delta^2\bar{u}_i = \bar{u}_{i+1} - 2\bar{u}_i + \bar{u}_{i-1}. \tag{8.11}$$

(3)令

$$u_{i+\frac{1}{2}} = p(x_{i+\frac{1}{2}}), \tag{8.12}$$

得到 $u_{i+1/2}$ 的组合表达式和数值流通量.如上述特例情况下,根据(8.9)和(8.10),我们得到

$$u_{i+\frac{1}{2}} = p(x_{i+\frac{1}{2}}) = (a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2)\Big|_{\xi=\frac{1}{2}}, \tag{8.13}$$

代入(8.11)系数值,求得组合系数和数值流通量

$$\begin{aligned} u_{i+\frac{1}{2}} &= -\frac{1}{6}\bar{u}_{i-1} + \frac{5}{6}\bar{u}_i + \frac{1}{3}\bar{u}_{i+1}, \\ f(u_{i+\frac{1}{2}}) &= f\left(-\frac{1}{6}\bar{u}_{i-1} + \frac{5}{6}\bar{u}_i + \frac{1}{3}\bar{u}_{i+1}\right), \end{aligned} \tag{8.14}$$

选择其他不同的模板,可得不同的系数组合.又如选择模板 $S = \{I_{i-2}, I_{i-1}, I_i\}$ 时,得

$$u_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{3}\bar{u}_{i-2} - \frac{7}{6}\bar{u}_{i-1} + \frac{11}{6}\bar{u}_i.$$

由数值分析可知,如果模板包含 r 个单元,则格式具有 r 阶逼近精度,即

$$\left| u_{i+\frac{1}{2}} - u^{\text{exact}}_{i+\frac{1}{2}} \right| \leqslant c\Delta x^r.$$

假定 $f'(u) \geqslant 0$,下面给出几种不同的模板选择.

[固定的节点模板方案]

这是单元模板或者节点的模板预先给定的情况.根据前面的过程(8.8~8.14)同样可以得到以下的结果.

(a) 一单元的模板 $\{I_i\}$.即

$$p(x) = \bar{u}_i, \tag{p1-1}$$

$$u_{i+1/2} = \bar{u}_i. \tag{s1-1}$$

仅有一阶精度的单调迎风格式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{u}_i + \frac{1}{\Delta x}[f(\bar{u}_i) - f(\bar{u}_{i-1})] = 0. \tag{f1-1}$$

(b) 两单元的节点模板.

(b1)

$$S = \{I_{i-1}, I_i\},$$

$$p(x) = \bar{u}_i + (\bar{u}_i - \bar{u}_{i-1})\xi, \tag{p2-1}$$

$$u_{i+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{2}\bar{u}_{i-1} + \frac{3}{2}\bar{u}_i. \tag{s2-1}$$

此时,二阶迎风格式为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{u}_i + \frac{1}{\Delta x}\left[f\left(-\frac{1}{2}\bar{u}_{i-1} + \frac{3}{2}\bar{u}_i\right) - f\left(-\frac{1}{2}\bar{u}_{i-2} + \frac{3}{2}\bar{u}_{i-1}\right)\right] = 0. \tag{f2-1}$$

(b2)

$$S = \{I_i, I_{i+1}\},$$

$$p(x) = \bar{u}_i + (u_{i+1} - u_i)\xi, \tag{p2-2}$$

$$u_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}\bar{u}_i + \frac{1}{2}\bar{u}_{i+1}. \tag{s2-2}$$

则可得如下中心格式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{u}_i + \frac{1}{\Delta x}\left[f\left(\frac{1}{2}\bar{u}_i + \frac{1}{2}\bar{u}_{i+1}\right) - f\left(\frac{1}{2}u_{i-1} + \frac{1}{2}\bar{u}_i\right)\right] = 0. \tag{f2-2}$$

实验结果表明,格式(b1)会出现少许振荡,而格式(b2)则会严重振荡.

(c) 包含三个单元的节点模板.

前而我们刚刚已经构造过,它们是

(c1) $S = \{I_{i-2}, I_{i-1}, I_i\}$,即 $u_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{3}\bar{u}_{i-2} - \frac{7}{6}\bar{u}_{i-1} + \frac{11}{6}\bar{u}_i$. (s3-1)

(c2) $S = \{I_{i-1}, I_i, I_{i+1}\}$,即 $u_{i+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{6}\bar{u}_{i-1} + \frac{5}{6}\bar{u}_i + \frac{1}{3}\bar{u}_{i+1}$. (s3-2)

(c3) $S = \{I_i, I_{i+1}, I_{i+2}\}$,即 $u_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{3}\bar{u}_i + \frac{5}{6}\bar{u}_{i+1} - \frac{1}{6}\bar{u}_{i+2}$. (s3-3)

相应的多项式 $p(x) = \bar{p}(\xi) = a_0 + a_1\xi + a_2\xi^2$、单元边界点(半网格节点)上的值 $u_{i+1/2}$,以及数值流函数型的格式等,不再一一列出.

在 Shu 的著名学术报告[203]的表 2-1 中,有直至 7 阶精度的各种单元模板的表达形式.

[逐次扩充的节点模板方案——ENO 方法]

对于上述的固定模板(fix stencil)选择,如果某点 x_i 包含在间断附近,即包含间断单元,数值结果会出现振荡,在谱方法中把这种振荡现象称为 Gibbs 现象.为了克服这些困难,我们很自然地想到,利用可调节模板(adaptive sten-

cil)代替固定模板，尽量避免在所选择的模板中包含间断，则可以有效地抑制非物理振荡．这就是 ENO 方法．它是一种具有高阶精度的方法．我们知道，利用牛顿差商(Newton divided differences)绝对值的大小，可以判断单元内的函数的光滑程度．而我们所要的是尽可能光滑的单元，所以，为了有效地选择模板，我们首先引进函数的牛顿差商，及其构成方法．

对于区间 I_j，函数平均值 $\bar{u}$ 的零阶差商为

$$\bar{v}[j] = \bar{u}_j,$$

一阶差商为

$$\bar{v}[j, j+1] = \frac{\bar{v}[j+1] - \bar{v}[j]}{x_{j+1} - x_j},$$

k 阶差商为

$$\bar{v}[j, j+1, \cdots, j+k] = \frac{\bar{v}[j+1, \cdots, j+k] - \bar{v}[j, \cdots, j+k-1]}{x_{j+k} - x_j}.$$

并且差商具有性质

$$\bar{v}[j, j+1, \cdots, j+k] = \frac{\bar{u}^{(k)}(\xi)}{k!}, \tag{8.15}$$

其中，$x_{j-\frac{1}{2}} \leqslant \xi \leqslant x_{j+\frac{1}{2}}$.

利用比较差商绝对值的大小，我们可以进行模板选择．例如，对每一点 $j+\dfrac{1}{2}$，首先确定模板

$$S_1 = \{I_j\}, \tag{8.16}$$

令 $\text{sten}(j) = j$，此时格式只具有一阶精度．若要提高方法的精度，需要扩充模板．再扩展一个节点，则模板 S_2 有两种选择，

$$S_2 = \begin{cases} S_1 \cup \{I_{\text{sten}(j)-1}\}, \\ S_1 \cup \{I_{\text{sten}(j)+1}\}, \end{cases} \tag{8.17}$$

或者说是向右，还是向左增加一点的问题．此时需要利用比较左右斜率即差商绝对值的大小进行取舍．如果

$$|\bar{v}[j-1, j]| \leqslant |\bar{v}[j, j+1]|, \tag{8.18}$$

则增加单元 $I_{\text{sten}(j)-1}$，即

$$S_2 = S_1 \cup \{I_{\text{sten}(j)-1}\}, \tag{8.19}$$

否则，增加单元 $I_{\text{sten}(j)+1}$，依次类推．这就是利用牛顿差商进行模板选择的基本思想．

我们给出一个通用的模板选择的 Fortran 子程序块，令 $ub(m, i)$ 表示二维数组，第二个指标表示差商的阶数，$is(j)$ 表示最左端单元．要求格式具有 k 阶精度，在等步长情况下，不妨假设 $\Delta x = 1$.

```
do j= -k+1,N+k
ub(j,0)=u(j)
enddo
do i=1,k-1
do j= -k+1,N+k-i
ub(j,i)=ub(j+1,i-1)-ub(j,i-1)
enddo
enddo
do j=1,N
is(j)=j
do i=1,k-1
if(abs(ub(is(j)-1,l)) .lt. abs(ub(is(j),l)))
  is(j)=is(j)-1
  enddo
  enddo
```

已知函数单元的平均值,利用 ENO 方法构造多至 $k-1$ 次分段多项式的步骤如下:

(1) 利用原函数 $V(x)=\int_{-\infty}^{x}u(\xi)d\xi$,即

$$V\left(x_{i+\frac{1}{2}}\right)=\sum_{-\infty}^{i}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}v\ (\xi)d\xi=\sum_{-\infty}^{i}\bar{u}_j\Delta x_j.$$

或者直接采用格子的平均值,计算 $\bar{u}$ 的各阶差商值

$$\bar{v}[j]=\bar{u}_j,\bar{v}[j,j+1],\cdots,\bar{v}[j,j+1,\cdots,j+k].$$

(2) 由函数平均值 $\bar{u}$ 的一点模板 $S_1(i)=\{I_i\}$ 开始,即相当于原函数 $V(x)$的两节点模板 $\tilde{S}_1(i)=\left\{x_{i-\frac{1}{2}},x_{i+\frac{1}{2}}\right\}$.

(3) 对 $l=2,3,\cdots,k$,假定已知 $\tilde{S}_l(i)=\left\{x_{j+\frac{1}{2}},\cdots,x_{j+l-\frac{1}{2}}\right\}$. 扩展节点模板有两种可能,即是左插入点 $x_{j-\frac{1}{2}}$,或是向右插入点 $x_{j+l+\frac{1}{2}}$. 利用比较差商绝对值大小进行取舍的方法判定、选择扩展的节点模板.

(4) 根据最终模板,利用 Lagrange 形式或牛顿形式求得在单元 I_i 上至多 $k-1$ 次多项式,进而得到边界点处的近似值 $u_{i+\frac{1}{2}}^-=p_i(x_{i+\frac{1}{2}})$, $u_{i-\frac{1}{2}}^+=p_i(x_{i-\frac{1}{2}})$.

以上讨论皆假定 $f'(u)\geqslant 0$. 下面给出当 $f'(u)$是任意函数时的求解方法. 对于我们所讨论的守恒律组的积分形式(8.6),我们有如下的守恒格式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\bar{u}_i + \frac{1}{\Delta x_i}\left[\hat{f}\left(u_{j+\frac{1}{2}}^-, u_{j+\frac{1}{2}}^+\right) - \hat{f}\left(u_{j-\frac{1}{2}}^-, u_{j-\frac{1}{2}}^+\right)\right] = 0, \qquad (8.20)$$

$\hat{f}(u^+, u^-)$为 ENO 方法的数值流通量，满足如下几个性质：

(ⅰ) $\hat{f}(\cdot,\cdot)$是 Lipschitz 连续的.

(ⅱ) 具有相容性(consistency)，即 $\hat{f}(u,u) = f(u)$.

(ⅲ) 具有单调性 $\hat{f}(\uparrow,\downarrow)$，即对第一个变量非减，第二个变量非增.

2. 有限差分格式

前面讨论的出发点是已知准确初值的平均值，而后在积分平均的意义上进行的讨论. 如果像一般差分方法那样，已知的初值是在单元格点上的值时，我们可以设计的是有限差分型格式.

设网格步长为 Δx，记函数在网格节点上的值为 $u_i = u(x_i, t)$，此时格式为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}u_j + \frac{1}{\Delta x}\left[\hat{f}_{j+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{j-\frac{1}{2}}\right] = 0, \qquad (8.21)$$

$\hat{f}_{j+\frac{1}{2}}$为数值流通量，使得格式具有 r 阶精度，即

$$\frac{1}{\Delta x}\left[\hat{f}_{j+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{j-\frac{1}{2}}\right] = (f(u))_x\big|_{x=x_j} + O(\Delta x^r). \qquad (8.22)$$

如果我们找到可能依赖于网格步长 Δx 的函数 $h(x)$，使得

$$\frac{1}{\Delta x}\int_{x-\frac{\Delta x}{2}}^{x+\frac{\Delta x}{2}} h(\xi)\mathrm{d}\xi = f(u(x,t)) + O(\Delta x^r), \qquad (8.23)$$

则可取 $\hat{f}_{j+\frac{1}{2}} = h\left(x_{j+\frac{1}{2}}\right)$，且

$$f(u(x,t))_x\big|_{x=x_j} = \frac{1}{\Delta x}\left[h\left(x_{j+\frac{1}{2}}\right) - h\left(x_{j-\frac{1}{2}}\right)\right] + O(\Delta x^r). \qquad (8.24)$$

下面讨论如何求满足上述条件的函数 $h(x)$. 很容易看出，函数 $h(x)$的平均值为 $\bar{h}_j = f(u_j)$，这相当于已知 $\{\bar{h}_j\}_{j=1}^N$，构造$\left\{h\left(x_{j+\frac{1}{2}}\right)\right\}_{j=1}^N$，此时就可以利用我们在前面有限体积格式中讨论的重构技巧. 由此可进一步进行 ENO 格式的构造.

有限体积格式不要求网格一定是一致的，而有限差分方法只能适用于均匀网格或光滑网格. 有限差分格式和有限体积格式对一维线性 PDE 问题是相近的，惟一的不同是它们的初始条件不同，有限体积方法是利用的准确初值的单元平均值，而有限差分格式则是利用准确初值的节点值. 当然格式仍然是非线性的，然而，这些相似之处对非线性 PDE 问题是不成立的.

3. weighted ENO 方法

WENO 方法是在 ENO 方法的基础上发展起来的. 从前面的讨论可以看出,ENO 方法是高精度的方法. 它通过比较差商的绝对值的大小自适应地选择模板. 对于这种重构方法,还有很多地方有待改进:譬如,解及其导数在零点附近产生的舍入误差可能会改变模板的选择;由于在相临点处模板的改变,导致数值流通量不光滑;在进行模板选择时,为了得到 k 阶精度的格式,需要 k 个单元,总体覆盖了 $2k-1$ 个单元. 但是,仅仅只有一种形式的模板被使用,甚为浪费. 如果覆盖的 $2k-1$ 个单元都被利用,则在光滑区域可得到 $2k-1$ 阶精度;ENO 模板选择程序包含很多"如果"型结构,这在真正的使用中并不是很有效.

weighted ENO 方法以 ENO 方法为基础,并消除了上面几点不足. 其主要思想是:不是选择其中一种模板,而是利用所谓模板的凸组合. 具体来讲,假定 k 个参选的模板为

$$S_r(i) = \{x_{i-r}, \cdots, x_{i-r+k-1}\}, \quad r = 0, \cdots, k-1, \tag{8.25}$$

可以得到求 $u_{i+\frac{1}{2}}$ 的 k 个不同的重构方式

$$u_{i+\frac{1}{2}}^{(r)} = \sum_{j=0}^{k-1} c_{rj}\bar{u}_{i-r+j}, \quad r = 0, \cdots, k-1. \tag{8.26}$$

WENO 格式是利用所有 $u_{i+\frac{1}{2}}^{(r)}$ 的值的凸组合,来计算 $u(x_{i+\frac{1}{2}})$:

$$u_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{r=0}^{k-1} w_r u_{i+\frac{1}{2}}^{(r)}. \tag{8.27}$$

并且为了满足稳定性和相容性,要求

$$w_r \geqslant 0, \quad \sum_{r=0}^{k-1} w_r = 1. \tag{8.28}$$

进一步,如果函数 $u(x)$ 在所有的模板中是光滑函数,则存在常数 d_r,使得

$$u_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{r=0}^{k-1} d_r u_{i+\frac{1}{2}}^{(r)} = u(x_{i+\frac{1}{2}}) + O(\Delta x^{2k-1}). \tag{8.29}$$

例如 $k=1$ 时,$d_0=1$;

$$k=2 \text{ 时}, d_0=\frac{2}{3}, d_1=2; \tag{8.30}$$

$$k=3 \text{ 时}, d_0=\frac{3}{10}, d_1=\frac{3}{5}, d_2=\frac{1}{10}. \tag{8.31}$$

很容易看出,由于相容性,且 $\sum_{r=0}^{k-1} d_r = 1$.

在光滑情形,我们有

$$w_r = d_r + O(\Delta x^{k-1}), \quad r = 0,\cdots,k-1, \tag{8.32}$$

这蕴涵着 $2k-1$ 阶精度

$$u_{i+\frac{1}{2}} = \sum_{r=0}^{k-1} w_r u_{i+\frac{1}{2}}^{(r)} = u(x_{i+\frac{1}{2}}) + O(\Delta x^{2k-1}), \tag{8.33}$$

这是因为

$$\begin{aligned}\sum_{r=0}^{k-1} w_r u_{i+\frac{1}{2}}^{(r)} - \sum_{r=0}^{k-1} d_r u_{i+\frac{1}{2}}^{(r)} &= \sum_{r=0}^{k-1} (w_r - d_r)\left(u_{i+\frac{1}{2}}^{(r)} - u(x_{i+\frac{1}{2}})\right) \\ &= \sum_{r=0}^{k-1} O(\Delta x^{k-1}) O(\Delta x^k) = O(\Delta x^{2k-1}).\end{aligned}$$

WENO 格式中，权函数应该光滑，并且当模板包含间断时，w_r 应该取为 0. 为了计算有效，我们可以利用如下形式的权

$$w_r = \frac{\alpha_r}{\sum_{s=0}^{k-1}\alpha_s}, \quad r = 0,\cdots,k-1, \quad \alpha_r = \frac{d_r}{(\epsilon + \beta_r)^2}, \tag{8.34}$$

这里 $\epsilon>0$ 的引入是为了避免分母为零，可以取 $\epsilon = 10^{-6}$. β_r 称做"光滑因子". 假设模板 $S_r(i)$ 上的重构多项式为 $p_r(x)$，则通过广泛的实验验证，我们可以如下选择 β_r：

$$\beta_r = \sum_{l=1}^{k-1} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \Delta x^{2l-1} \left(\frac{\partial^l p_r(x)}{\partial^l x}\right)^2 \mathrm{d}x \tag{8.35}$$

例如，当 $k=2$ 时，$\beta_0 = (\bar{u}_{i+1} - \bar{u}_i)^2, \quad \beta_1 = (\bar{u}_i - \bar{u}_{i-1})^2.$　　(8.36)

当 $k=3$ 时，

$$\begin{aligned}\beta_0 &= \frac{13}{12}(\bar{u}_i - 2\bar{u}_{i+1} + \bar{u}_{i+2})^2 + \frac{1}{4}(3\bar{u}_i - 4\bar{u}_{i+1} + \bar{u}_{i+2})^2, \\ \beta_1 &= \frac{13}{12}(\bar{u}_{i-1} - 2\bar{u}_i + \bar{u}_{i+1})^2 + \frac{1}{4}(\bar{u}_{i-1} - \bar{u}_{i+1})^2, \\ \beta_2 &= \frac{13}{12}(\bar{u}_{i-2} - 2\bar{u}_{i-1} + \bar{u}_i)^2 + \frac{1}{4}(\bar{u}_{i-2} - 4\bar{u}_{i-1} + 3\bar{u}_i)^2.\end{aligned} \tag{8.37}$$

8.2　时间离散和 Runge-Kutta 方法[203]

1. Runge-Kutta 型时间离散格式

迄今为止，我们只考虑了空间离散. 现在进一步考虑时间离散方法. 时间离散格式是为了逐时间层求解前面空间离散的方程，诸如式(8.6)(8.7)等，所得出的具有初值的常微分方程组问题：

$$u_t = L(u), \tag{8.38}$$

其中 $L(u)$是 $-f(u)_x$ 的逼近.

首先我们考虑简单的 Euler 前差：

$$u^{n+1} = u^n + \Delta t L(u^n), \tag{8.39}$$

它在一定模意义下是稳定的，如果有某个合理的时间步长约束，即 $\Delta t \leqslant \Delta t_0$，则有

$$\|(I + \Delta t L)(u)\| \leqslant \|u\|,$$

这里的模可以取为总变差，因此又可以称做 TVD 时间离散．我们更主要的是讨论 TVD Runge-Kutta 型的时间离散格式

$$\begin{aligned} u^{(i)} &= \sum_{k=0}^{i-1}(\alpha_{ik}u^{(k)} + \Delta t\, \beta_{ik} L(u^{(k)})), \quad i = 1,\cdots,m, \\ u^{(0)} &= u^n, \quad u^{(m)} = u^{n+1}. \end{aligned} \tag{8.40}$$

显然，如果系数 $\alpha_{ik} \geqslant 0, \beta_{ik} \geqslant 0$，则上面的时间离散格式恰好是 Euler 前差的凸组合，且

$$\sum_{k-1}^{i-1}\alpha_{ik} = 1. \tag{8.41}$$

如果 $\Delta t\, \beta_{10} \leqslant \Delta t_0$，

$$\|u^{(1)}\| = \|(I + \Delta t\, \beta_{10} L)u^{(0)}\| \leqslant \|u^{(0)}\|.$$

进一步，如果$\frac{\beta_{20}}{\alpha_{20}}\Delta t \leqslant \Delta t_0, \frac{\beta_{21}}{\alpha_{21}}\Delta t \leqslant \Delta t_0$时，由于 $\alpha_{20} + \alpha_{21} = 1$，有

$$\begin{aligned} \|u^{(2)}\| &= \|\alpha_{20}(I + \Delta t\, \beta_{20}/\alpha_{20} L)u^{(0)} + \alpha_{21}(I + \Delta t\, \beta_{21}/\alpha_{21} L)u^{(1)}\| \\ &\leqslant \alpha_{20}\|(I + \Delta t\, \beta_{20}/\alpha_{20}\, L)u^{(0)}\| + \alpha_{21}\|(I + \Delta t\, \beta_{21}/\alpha_{21}\, L)u^{(1)}\| \\ &\leqslant \alpha_{20}\|u^{(0)}\| + \alpha_{21}\|u^{(1)}\| \\ &\leqslant \alpha_{20}\|u^{(0)}\| + \alpha_{21}\|u^{(0)}\| = \|u^{(0)}\|, \end{aligned}$$

进一步可以推出$\|u^{n+1}\| \leqslant \|u^n\|$，因此有

引理 8.1 Runge-Kutta 时间离散格式(8.40)是 TVD 的，如果

$$\alpha_{ik} \geqslant 0, \beta_{ik} \geqslant 0, \text{则 } c = \min_{i,k}\frac{\alpha_{ik}}{\beta_{ik}} \text{ 和 } \Delta t \leqslant c\Delta t_0 \tag{8.42}$$

(c 称为高阶时间离散的 CFL 系数).

例如，最优的二阶 TVD Runge-Kutta 格式(CFL 数为 1)：

$$\begin{aligned} u^{(1)} &= u^n + \Delta t L(u^n), \\ u^{n+1} &= \frac{1}{2}u^n + \frac{1}{2}u^{(1)} + \frac{1}{2}\Delta t L(u^{(1)}). \end{aligned} \tag{8.43}$$

最优的三阶 TVD Runge-Kutta 格式(CFL 数为 1)：

$$\begin{aligned} u^{(1)} &= u^n + \Delta t L(u^n), \\ u^{(2)} &= \frac{3}{4}u^n + \frac{1}{4}u^{(1)} + \frac{1}{4}\Delta t L(u^{(1)}), \end{aligned}$$

$$u^{n+1} = \frac{1}{3}u^n + \frac{2}{3}u^{(2)} + \frac{2}{3}\Delta t L(u^{(2)}). \tag{8.44}$$

定理 8.1 不存在4步4阶 TVD Runge-Kutta 格式,使得 $\alpha_{ik} \geqslant 0, \beta_{ik} \geqslant 0$.

所以在实际计算时,如果用到4阶方法,我们必须考虑 $\alpha_{ik} \geqslant 0$,而 β_{ik} 有可能为负的情形.为此,引进 L 的共轭算子 $\tilde{L}$,使得

$$u^{n+1} = u^n - \Delta t \tilde{L}(u^n).$$

对于双曲守恒律组,可以通过求解方程

$$u_t = f(u)_x$$

来得到.例如对偏微分方程 $u_t + u_x = 0$,

$$L(u) = -\frac{u_j - u_{j-1}}{\Delta x}, \tilde{L}(u) = -\frac{u_{j+1} - u_j}{\Delta x}.$$

即从数值角度讲,它们惟一的不同是风向的不同,显然,L 和 $\tilde{L}$ 的计算量是相同的.可以说

(1) L 和 $\tilde{L}$ 是逼近同一个函数的空间微分算子.

(2) L 是 Euler 前差稳定,即 $\| (I + \Delta t L)(u) \| \leqslant \| u \|$.

(3) $\tilde{L}$ 是 Euler 后差稳定,即 $\| (I - \Delta t \tilde{L})(u) \| \leqslant \| u \|$.

引理 8.2 如果 $\alpha_{ik} \geqslant 0$,,并且当 β_{ik} 为负时,用算子 $\tilde{L}$ 代替 L,在 CFL 条件 $\Delta t \leqslant c \Delta t_0$ 下,其中

$$c = \min_{i,k} \frac{\alpha_{ik}}{|\beta_{ik}|} \tag{8.45}$$

格式(8.40)是 TVD 的.

例如,四阶 TVD Runge-Kutta 时间离散格式为

$$\begin{aligned}
u^{(1)} &= u^n + \frac{1}{2}\Delta t L(u^n), \\
u^{(2)} &= \frac{649}{1600}u^{(0)} - \frac{10890423}{25193600}\Delta t \tilde{L}(u^n) \\
&\quad + \frac{951}{1600}u^{(1)} + \frac{5000}{7873}\Delta t L(u^{(1)}), \\
u^{(3)} &= \frac{53989}{2500000}u^n - \frac{102261}{5000000}\Delta t \tilde{L}(u^n) + \frac{4806213}{20000000}u^{(1)} \\
&\quad - \frac{5121}{20000}\Delta t \tilde{L}(u^{(1)}) + \frac{23619}{32000}u^{(2)} + \frac{7873}{10000}\Delta t L(u^{(2)}), \\
u^{n+1} &= \frac{1}{5}u^n + \frac{1}{10}\Delta t L(u^n) + \frac{6127}{30000}u^{(1)} + \frac{1}{6}\Delta t L(u^{(1)}) \\
&\quad + \frac{7873}{30000}u^{(2)} + \frac{1}{3}u^{(3)} + \frac{1}{6}\Delta t L(u^{(3)}).
\end{aligned} \tag{8.46}$$

我们可以看到,对上述格式,$\tilde{L}$ 出现了三次,而对于相同的 k,$L(u^{(k)})$ 和

$\widetilde{L}(u^{(k)})$都必须计算,计算量和存储量都变为二倍.因此,我们应尽量避免负β_{ik}的出现.

通过数值实验结果表明,利用 TVD Runge-Kutta 时间离散,对求解双曲问题是卓有成效的,它不但保证在每一时间离散中间步,格式是 TVD 的,而且有效地抑制了振荡.

2. TVD 多步方法

TVD 多步方法和前面介绍的 TVD Runge-Kutta 方法类似,一般的多步方法的格式为

$$u^{n+1} = \sum_{i=0}^{k} \left(\alpha_i u^{n-i} + \Delta t \beta_i L(u^{n-i}) \right), \tag{8.47}$$

这里 $\alpha_i \geqslant 0, \beta_i \geqslant 0$,且$\sum_{i=0}^{k} \alpha_i = 1$(相容性).当$\frac{\beta_i}{\alpha_i}\Delta t \leqslant \Delta t_0$时,格式是非线性稳定的,这是因为

$$\| u^{n+1} \| \leqslant \sum_{i=0}^{k} \alpha_i \left\| u^{n-i} + \frac{\beta_i}{\alpha_i} \Delta t L(u^{n-i}) \right\| \leqslant \sum_{i=0}^{k} \alpha_i \| u^{n-i} \| \leqslant \cdots \leqslant \max_{0 \leqslant i \leqslant k} \| u^i \|.$$

引理 8.3 TVD 多步方法(8.47),当 $\alpha_i \geqslant 0, \beta_i \geqslant 0$,且 $c\Delta t \leqslant \Delta t_0$, $c = \min_i \frac{\alpha_i}{\beta_i}$时是 TVD 的.

例如,三步($k=2$)二阶 TVD 格式为

$$u^{n+1} = \frac{3}{4} u^n + \frac{3}{2} \Delta t L(u^n) + \frac{1}{4} u^{n-2}, \quad CFL \leqslant 0.5, \tag{8.48}$$

它和二阶 TVD Runge-Kutta 方法具有相同的模拟效果,但是需要的存储量增大了,而且存在着如何求解初值 u^1, u^2 的问题.

五步($k=4$)三阶 TVD 格式为

$$u^{n+1} = \frac{25}{32} u^n + \frac{25}{16} \Delta t L(u^n) + \frac{7}{32} u^{n-4} + \frac{5}{16} \Delta t L(u^{n-4}), \tag{8.49}$$

$$CFL \leqslant 0.5,$$

它比三阶 TVD Runge-Kutta 方法的模拟效果要好,但问题仍是需要的存储量很大,而且起步初值 u^1, u^2, u^3, u^4 还存在着需要解决的困难.

对于多步方法,我们仍然没能找到满足引理条件的四阶以上的方法,和 TVD Runge-Kutta 方法中四阶以上问题的讨论一样,为了放宽条件 $\beta_i \geqslant 0$,需要利用共轭算子 $\widetilde{L}$.

引理 8.4 在多步方法(8.47)中,$\alpha_i \geqslant 0$,而当 $\beta_i < 0$ 时,利用共轭算子 $\widetilde{L}$ 代替算子 L,且 $c\Delta t \leqslant \Delta t_0$,其中 $c = \min_i \frac{\alpha_i}{|\beta_i|}$时,则格式是 TVD 的.

例如,六步四阶多步方法的格式为

$$u^{n+1}=\frac{747}{1280}u^{n}+\frac{237}{128}\Delta tL(u^{n})+\frac{81}{256}u^{n-4}$$
$$+\frac{165}{128}\Delta tL(u^{n-4})+\frac{1}{10}u^{n-5}-\frac{3}{8}\Delta t\widetilde{L}(u^{n-5}),CFL\leqslant 0.245.$$

8.3　二维标量方程的 ENO 和 WENO 方法

考虑具有适当的初边值条件的二维标量方程

$$u_t+f(u)_x+g(u)_y=0,\tag{8.50}$$

定义区域为$[a,b]\times[c,d]$,剖分单元为

$$I_{ij}=\left[x_{i-\frac{1}{2}},x_{i+\frac{1}{2}}\right]\times\left[y_{j-\frac{1}{2}},y_{j+\frac{1}{2}}\right],\quad 1\leqslant i\leqslant N_x,\quad 1\leqslant j\leqslant N_y.$$

其中

$$a=x_{\frac{1}{2}}<x_{\frac{3}{2}}<\cdots<x_{N_x-\frac{1}{2}}<x_{N_x+\frac{1}{2}}=b,$$
$$c=y_{\frac{1}{2}}<y_{\frac{3}{2}}<\cdots<y_{N_y-\frac{1}{2}}<y_{N_y+\frac{1}{2}}=d.$$

网格中心点为

$$(x_i,y_j),x_i=\frac{1}{2}\left(x_{i-\frac{1}{2}}+x_{i+\frac{1}{2}}\right),\quad y_j=\frac{1}{2}\left(y_{j-\frac{1}{2}}+y_{j+\frac{1}{2}}\right).$$

仍记相应的网格步长为

$$\Delta x_i=x_{i+\frac{1}{2}}-x_{i-\frac{1}{2}},\quad i=1,2,\cdots,N_x;\quad \Delta y_j=y_{j+\frac{1}{2}}-y_{j-\frac{1}{2}},\quad j=1,2,\cdots,N_y$$

进一步定义

$$\Delta x=\max_{1\leqslant i\leqslant N_x}\Delta x_i,\quad \Delta y=\max_{1\leqslant j\leqslant N_y}\Delta y_j,\quad \Delta=\max(\Delta x,\Delta y).$$

记 $\bar{u}$ 表示 x 方向的单元平均值算子,$\tilde{u}$ 表示 y 方向的单元平均算子

$$\bar{u}=\frac{1}{\Delta x}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}u\mathrm{d}x,\quad \tilde{u}=\frac{1}{\Delta y}\int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}}u\mathrm{d}y,$$

则

$$\tilde{\bar{u}}=\frac{1}{\Delta x\Delta y}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}\int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}}u\mathrm{d}x\mathrm{d}y.$$

1. 有限体积方法

已知单元平均值$\{\tilde{\bar{u}}_{ij}:1\leqslant i\leqslant N_x,1\leqslant j\leqslant N\}$,构造函数 $u(x,y)$在单元边界点上的近似值.即在单元 I_{ij}上,求多至 $k-1$ 次多项式 $p_{ij}(x,y)$,使得它在单元 I_{ij}内部逼近函数$u(x,y)$:

$$p_{ij}(x,y) = u(x,y) + O(\Delta^k).$$

特别可进一步求出函数 $u(x,y)$在单元边界的逼近值

$$u^-_{i+\frac{1}{2},y} = p_{ij}(x_{i+\frac{1}{2}},y), \quad u^+_{i-\frac{1}{2},y} = p_{ij}(x_{i-\frac{1}{2}},y), \quad i = 1,2,\cdots,N_x,$$

$$y_{j-\frac{1}{2}} \leqslant y \leqslant y_{j+\frac{1}{2}},$$

$$u^-_{x,j+\frac{1}{2}} = p_{ij}(x,y_{j+\frac{1}{2}}), \quad u^+_{x,j-\frac{1}{2}} = p_{ij}(x,y_{j-\frac{1}{2}}), \quad j = 1,2,\cdots,N_y,$$

$$x_{i-\frac{1}{2}} \leqslant x \leqslant x_{i+\frac{1}{2}}.$$

而且具有 k 阶精度

$$u^{\pm}_{i+\frac{1}{2},y} = u(x_{i+\frac{1}{2}},y) + O(\Delta^k), \quad i = 1,2,\cdots,N_x, \quad y_{j-\frac{1}{2}} \leqslant y \leqslant y_{j+\frac{1}{2}},$$

$$u^{\pm}_{x,j+\frac{1}{2}} = u(x,y_{j+\frac{1}{2}}) + O(\Delta^k), \quad j = 1,2,\cdots,N_y, \quad x_{i-\frac{1}{2}} \leqslant x \leqslant x_{i+\frac{1}{2}}.$$

对矩形网格,我们利用一维多项式的张量积,即利用多项式

$$p(x,y) = \sum_{m=0}^{k-1}\sum_{l=0}^{k-1} a_{lm}x^l x^m,$$

类似一维情形进行构造.但是,这种二维情形的构造方法计算量是很高的,但是它优于有限差分方法,适用于非正交网格.

2. 有限体积 ENO 和 WENO 方法

对方程(8.50)在单元 I_{ij}上积分,可得

$$\frac{\mathrm{d}\,\tilde{\bar{u}}_{ij}(t)}{\mathrm{d}t} + \frac{1}{\Delta x_i \Delta y_j}\left(\int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} f\,(u(x_{i+\frac{1}{2}},y,t))\mathrm{d}y - \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} f\,(u(x_{i-\frac{1}{2}},y,t))\mathrm{d}y\right.$$

$$\left. + \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} g\,(u(x,y_{j+\frac{1}{2}},t))\mathrm{d}x - \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} g\,(u(x,y_{j-\frac{1}{2}},t))\mathrm{d}x\right) = 0.$$

则上式的逼近格式为

$$\frac{\mathrm{d}\,\tilde{\bar{u}}_{ij}}{\mathrm{d}t} + \frac{1}{\Delta x}\left[\bar{f}_{i+\frac{1}{2},j} - \bar{f}_{i-\frac{1}{2},j}\right] + \frac{1}{\Delta y}\left[\bar{g}_{i,j+\frac{1}{2}} - \bar{g}_{i,j-\frac{1}{2}}\right] = 0, \quad (8.51)$$

这里仍然不考虑边界条件.假定计算区域以外数值解的值是可以得到的,如周期边界条件或紧致问题.

利用如下定义的数值流通量

$$\hat{f}_{i+\frac{1}{2},j} = \sum_{\alpha} w_\alpha h(u^-_{i+\frac{1}{2},y_j+\beta_\alpha \Delta y_j}, u^+_{i+\frac{1}{2},y_j+\beta_\alpha \Delta y_j}), \quad (8.52a)$$

$$\hat{g}_{i,j+\frac{1}{2}} = \sum_{\alpha} w_\alpha h(u^-_{x_i+\beta_\alpha \Delta x_i,j+\frac{1}{2}}, u^+_{x_i+\beta_\alpha \Delta x_i,j+\frac{1}{2}}), \quad (8.52b)$$

分别近似求解 y 方向和 x 方向的积分

$$\frac{1}{\Delta y_j}\int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} f(u(x_{i-\frac{1}{2}},y,t))\mathrm{d}y,\quad \frac{1}{\Delta x_i}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} g(u(x,y_{j+\frac{1}{2}},t))\mathrm{d}x$$

其中 β_α 和 w_α 是高斯积分公式中出现的高斯积分点和相应的权. $u^{\pm}_{i+1/2,y}$ 和 $u^{\pm}_{x,j+1/2}$ 是利用 k 阶 ENO 和 WENO 的重构方法得到的.

我们前面所讨论的都是矩形网格.其实对于所谓 Delaunay 三角形网格的情况同样可以采用.可以参见文献[32,209].

3. 有限差分 ENO 和 WENO 方法

给定函数 $u(x,y)$ 的点值

$$u_{ij}=u(x_i,y_j),\quad i=1,2,\cdots,N_x,\quad j=1,2,\cdots,N_y,$$

这时的构造方法类似一维一样简单.事实上,对固定的 j,我们令 $w(x)=u(x,y_j)$,得到 $u_x(x_i,y_j)=w'(x_i)$,则可利用一维的构造方法构造函数 $w(x)$.类似地可讨论 $u_y(x,y)$ 的逼近方法.

这里假定网格是一致的,利用守恒形式逼近空间导数

$$\frac{\mathrm{d}\,\tilde{\bar{u}}_{ij}(t)}{\mathrm{d}t}+\frac{1}{\Delta x}\left[\bar{f}_{i+\frac{1}{2},j}-\bar{f}_{i-\frac{1}{2},j}\right]+\frac{1}{\Delta y}\left[\bar{g}_{i,j+\frac{1}{2}}-\bar{g}_{i,j-\frac{1}{2}}\right]=0,\quad (8.53)$$

其中 $u_{ij}(t)$ 是点值 $u(x_i,y_j,t)$ 的近似.

固定 j,令 $v(x)=f(u(x,y_j,t))$,则可以利用一维 ENO 和 WENO 的重构方法得到数值流通量 $\bar{f}_{i+1/2,j}$.同样固定 i,令 $v(y)=g(u(x_i,y,t))$,利用一维 ENO 和 WENO 的重构方法得到数值流通量 $\bar{g}_{i,j+\frac{1}{2}}$.

注意,所有前面讨论的关于一维的方法,如 ENO-Roe 方法,流通量分裂方法等在这里都可以逐维应用.如果有可能,我们提倡利用有限差分形式的 ENO 和 WENO 方法求解二维和高维问题.

8.4　方程组问题

1. 一维方程组

这里考虑双曲方程组

$$U_t+f(U)_x=0,\quad (8.54)$$

其中

$$U=\begin{pmatrix}u_1\\u_2\\\vdots\\u_m\end{pmatrix},\quad f(U)=\begin{pmatrix}f_1(u_1,u_2,\cdots,u_m)\\f_2(u_1,u_2,\cdots,u_m)\\\vdots\\f_m(u_1,u_2,\cdots,u_m)\end{pmatrix}\quad (8.55)$$

其 Jacobi 矩阵 $A(U)=f'(U)$ 有 m 个实的特征值

$$\lambda_1(u)\leqslant\lambda_2(u)\leqslant\cdots\leqslant\lambda_m(u)$$

和一个完备的特征向量集

$$r_1(u),r_2(u),\cdots,r_m(u).$$

定义矩阵

$$R(u)=(r_1(u),r_2(u),\cdots,r_m(u)),R^{-1}(u)f'(u)R(u)=\Lambda(u),$$

其中 Λ 是特征值组成的对角矩阵. 又设 $l_i(u)$ 是矩阵 $f'(u)$ 的左特征向量, $R^{-1}(u)=(l_1(u),l_2(u),\cdots,l_m(u))^{-1}$ 为左特征向量组成的矩阵.

(1) 有限体积逐元素分析的 ENO 和 WENO 格式

基于有限体积格式,ENO 和 WENO 重构方法的步骤如下:

a. 对于向量函数 u 中的每一元素,已知单元平均值,利用标量方程的 ENO 和 WENO 方法重构相应元素在单元交界处的值.

b. 对于每一个 i,利用准确的或近似的 Riemann 解算子计算数值流通量 $\hat{f}_{i+1/2}$.

c. 建立近似数值格式

$$\frac{\mathrm{d}\bar{u}_i(t)}{\mathrm{d}t}=-\frac{1}{\Delta x_i}\left(\hat{f}_{i+\frac{1}{2}}-\hat{f}_{i-\frac{1}{2}}\right).$$

(2) 有限差分逐元素分析的 ENO 和 WENO 格式

a. 进行数值流通量的分裂,最简单的如 Lax-Friedrichs 流通量的分裂,这里黏性系数 $\alpha=\max\limits_{u}\max\limits_{1\leqslant j\leqslant m}|\lambda_j(u)|$.

b. 对于解向量中的每一元素,利用适用于标量方程的方法构造数值流通量 $\hat{f}_{i+1/2}$.

c. 建立近似数值格式

$$\frac{\mathrm{d}u_i(t)}{\mathrm{d}t}=-\frac{1}{\Delta x_i}\left(\hat{f}_{i+\frac{1}{2}}-\hat{f}_{i-\frac{1}{2}}\right).$$

上述方法,数值格式简单,对很多问题计算有效,特别是对精度要求不是很高的问题比较适宜. 但是,对于很多高阶或是要求比较苛刻的问题,特征化分解方法则更为有效(见第四章).

首先考虑线性情形,即 $f(u)=Au$. 如果 A 是常数矩阵,设 $v=R^{-1}u$,则原方程可写为

$$v_t+\Lambda v_x=0.$$

即原方程解耦为 m 个互相独立的方程

$$\begin{cases}(v_1)_t + \lambda_1 v_1 = 0,\\(v_2)_t + \lambda_2 v_2 = 0,\\\cdots\cdots\\(v_m)_t + \lambda_m v_m = 0.\end{cases}$$

这时可以利用对标量方程适用的方法来构造逼近多项式,假设对第 j 变量,我们构造多项式 $q_j(x)$,则有

$$q(x) = \begin{pmatrix}q_1(x)\\q_2(x)\\\vdots\\q_m(x)\end{pmatrix},$$

并利用 $p(x)=Rq(x)$返回原物理空间.

当 $f'(u)$不是常数时,我们可以利用局部冻结系数的方法,或者采用 Roe 方法进行.

(3) 有限体积特征分解方法的 ENO 和 WENO 格式

a. 对所有的 i,计算单元平均值 $\bar{u}$ 的差商.

b. 在点 $x_{i+\frac{1}{2}}$处,方法如下进行:

ⅰ) 利用简单的算术平均或是 Roe 平均计算平均值 $u_{i+\frac{1}{2}}$.

ⅱ) 计算矩阵 $f'(u_{i-1/2})$的特征值,左右特征向量,记为

$$R = R(u_{i+\frac{1}{2}}),\quad R^{-1} = R^{-1}(u_{i+\frac{1}{2}}),\quad \Lambda = \Lambda(u_{i+\frac{1}{2}}).$$

ⅲ) 把 a 中计算出的,并在 ENO 和 WENO 模板选择重构中利用到的值投影到局部特征空间,如 $v_j = R^{-1}\bar{u}_j$.

ⅳ) 对于特征空间上的变量 $\bar{v}$ 中的每一元素利用标量 ENO 和 WENO 的重构方法得到相应的 $v^{\pm}_{i+1/2}$.

ⅴ) 把所得到的解转换到物理空间,这可以通过 $u^{\pm}_{i+1/2} = Rv^{\pm}_{i+1/2}$来实现.

c. 利用准确或近似的 Riemann 解计算数值流通量 $\hat{f}_{i+1/2}$,并形成数值格式

$$\frac{d\bar{u}_i(t)}{dt} = -\frac{1}{\Delta x_i}\left(\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{i-\frac{1}{2}}\right).$$

(4) 有限差分特征分解方法的 ENO 和 WENO-Roe 格式

a. 计算 $f(u)$的差商.

b. 在点 $x_{i+1/2}$处,方法如下进行:

ⅰ) 简单的算术平均或是 Roe 平均计算平均值 $u_{i+1/2}$.

ⅱ) 计算矩阵 $f'(u_{i+1/2})$的特征值,左右特征向量,记为

$$R = R\left(u_{i+\frac{1}{2}}\right), \quad R^{-1} = R^{-1}\left(u_{i+\frac{1}{2}}\right), \quad \Lambda = \Lambda\left(u_{i+\frac{1}{2}}\right).$$

ⅲ) 把ⅰ中计算出的，并在 ENO 和 WENO 模板选择重构中利用到的值投影到局部特征空间，如 $v_j = R^{-1}f(u_j)$.

ⅳ) 对于特征空间上的变量 v 中的每一元素利用标量 ENO 和 WENO 的重构方法得到相应的 $\hat{v}_{i+1/2}$，对于 v 的第 l 个变量，利用特征值来代替 Roe 速度 $\bar{a}_{i+1/2}$.

ⅴ) 把所得到的解转换到物理空间，这可以通过式 $\hat{f}_{i+1/2} = R\hat{v}_{i+1/2}$ 来实现.

c. 形成数值格式

$$\frac{\mathrm{d}u_i(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\Delta x}\left(\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{i-\frac{1}{2}}\right).$$

(5) 有限差分特征分解方法的算子分裂

a. 计算 $f(u)$ 和 u 的差商.

b. 在点 $x_{i+1/2}$ 处，方法如下进行：

ⅰ) 利用简单的算术平均或是 Roe 平均计算平均值 $u_{i+1/2}$.

ⅱ) 计算矩阵 $f'(u_{i+1/2})$ 的特征值，左右特征向量，记为

$$R = R\left(u_{i+\frac{1}{2}}\right), \quad R^{-1} = R^{-1}\left(u_{i+\frac{1}{2}}\right), \Lambda = \Lambda\left(u_{i+\frac{1}{2}}\right).$$

ⅲ) 把ⅰ)中计算出的，并为了得到数值流通量 $\hat{f}_{i+1/2}$ 而在 ENO 和 WENO 模板选择重构中利用到的值投影到局部特征空间，如

$$v_j = R^{-1}u_j, \quad g_j = R^{-1}f(u_j).$$

ⅳ) 对于特征空间上的变量 v 中的每一元素利用 ENO 和 WENO 的算子分裂方法得到 $\hat{g}^{\pm}_{i+1/2}$，对于 v 的第 l 个变量，利用最常用的算子分裂方法，此时黏性系数为

$$\alpha = \max_{1\leqslant j\leqslant N}\left|\lambda_1(u_j)\right|.$$

ⅴ) 把所得到的值转换到物理空间，这可以通过式 $\hat{f}^{\pm}_{i+1/2} = R\hat{g}^{\pm}_{i+1/2}$ 来实现.

c. 构造数值流通量 $\hat{f}_{i+1/2} = \hat{f}^{+}_{i+1/2} + \hat{f}^{-}_{i+1/2}$ 形成数值格式

$$\frac{\mathrm{d}u_i(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{\Delta x}\left(\hat{f}_{i+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{i-\frac{1}{2}}\right).$$

2. 二维方程组的 ENO 和 WENO 方法

对于守恒型二维方程组

$$U_t + f(U)_x + g(U)_y = 0,$$

对任意的实数 ξ_1 和 ξ_2，矩阵 $\xi_1 f'(u)+\xi_2 g'(u)$有 m 个实的特征值和一个完备的特征向量组．计算沿单元边界的数值流通量时，边界的法向利用一维局部特征分解方法；同时，单调数值流通量也用一维准确或近似的 Riemann 解代替，这样前面的讨论对二维方程组同样适用．

练习题

1．具有周期边界条件的方程 $u_t+u_x=0$，初值分别取 $u(x,0)=\sin 2\pi x$ 和 $u(x,0)=x$，　$x\in[0,1]$，利用前面给出的固定 ENO 节点方案格式(a)，(b1)和(b2)分别计算这两个问题的数值解，网格剖分点数分别取 $N=10$，20，40，80，160，时间离散采用至少二阶精度的离散格式，$\frac{\Delta t}{\Delta x}=0.5$，计算时间 $t=2$．

2．利用五阶 WENO 格式和三阶 TVD Runge-Kutta 时间离散格式求解方程

$$u_t+u_x=0,$$

其中 CFL=0.6，当 CFL$=O(\Delta x^{\frac{2}{3}})$时，给出格式的精度分析．

3．利用有限体积方法二阶 ENO 格式求解方程 $u_t+u_x=0$．

4．利用 5 阶有限差分 WENO 方法求解具有周期边界条件的方程 $u_t+u_x+u_y=0$，初值分别为 $u(x,y,0)=\sin(2\pi(x+y))$和 $u(x,y,0)=x+y$，其中 $0\leqslant x\leqslant 1, 0\leqslant y\leqslant 1$．

四、有限体积法篇

20 世纪 80 年代以来,一种强有力的数值解微分方程问题,特别是流体动力学问题的方法,有限体积法 (finite volume methods,简称 FVM) 得到迅速的发展和应用.它如有限差分方法 (finite difference methods, 简称 FDM) 和有限元方法 (finite element methods, 简称 FEM) 那样也得到广泛的关注和研究.特别是近十多年来,对于许多复杂的几何域的实际问题的数值计算和数值模拟,有限体积法显示了它独特的效果,开创了前所未有的美妙前景.

众所周知,FDM 简便易行、格式和离散方案丰富多采,求解变量设置随意.可是它对求解的几何域的适应性很差.FEM 基于弱解和变分形式,采用单元上的插值逼近.单元剖分的灵活性一定程度上保证了对解域的适应性问题,但是它对间断解问题的处理能力受到限制, 远没有前者的灵活和效能.FVM 在一定的程度上吸收了以上两类方法的长处,同时又克服了前者的弱点.首先,它一般从积分守恒形式出发,采用单元剖分,选择控制元离散.一般在控制元上取为常数逼近,形成间断解的 Riemann 问题.这样既保证了对复杂几何解域的适应性,又能直接和充分地利用有限差分法的许多格式和概念,尤其适应间断解的计算和模拟.因而在近代发展的高分辨率方法,例如 ENO、weighted ENO 和间断 Galerkin 等方法,与 Roe 方法相结合形成数值流向量的 FVM 型的重构方案.

事实上,早在 20 世纪 60 年代,Los Almos 的 Harlow 等人所提出的 MAC[87], FLIC, PIC 和 ALE 方法[246]就是有限体积法的雏形.70 年代,McDonald, MacCormack, Paullay 和 Patankar 等人可以说是有限体积法的先驱和开拓者(参见文献[220,231,172]).

80 年代以来,由于自适应网格、结构和非结构网格技术的发展,有限体积法得到了更长足的进步.有限体积法的研究和应用已经取得了很大的成功.也就是说,不仅在方法的设计和构造上,在处理大变形、激波和各种复杂流体动力学问题的能力,以及在方法的精度和收敛性的理论研究方面等,都已经有了实质的进展.特别是利用它所数值模拟的许多漂亮的结果,更为生动地展现了它的独特魅力.

本章的目的在于:实用地、简洁地介绍非结构网格的生成和发展,有限体积法的基本概念、思想、特点和构造,综述和评介现在的发展和应用.最后给出我们的数值算例.

第九章 非结构网格的生成和构造

在今天看起来,网格生成问题已经不仅仅是有限差分格式的网格剖分,有限元方法的有限单元的剖分,有限体积法的网格生成问题,而且,它也是计算机辅助几何设计(CAGD)和计算机辅助工程设计(CAED)的重要课题.对于计算流体力学,或者微分方程的数值解方法来说,它已经成为日益明显的重要组成部分[222].为什么会是这样呢?原因有两点:其一,网格生成的质量和效果,譬如它对解域几何复杂性、边界条件的适应能力和逼近程度,它对全域和局部区域的网格重分的可能性和编程的简易程度,它所生成的数据的自动化和智能化程度等,是直接关系到数值模拟和数值结果的好坏,在一定程度上是关键因素.其二,网格生成的任务和工作量常常是占据总工作量的相当大的部分,有时可能是极大部分,甚至 80%~90%.所以对于复杂的几何形状的流场的计算和数值模拟,其中网格生成实际上成了所谓的"瓶颈"问题.因而,网格的自动生成和所谓的自适应问题,已经是数值方法、计算机图形学、CAD 和 CAM 等的共同重要任务.

结构网格和非结构网格的区别在于网格的几何特征,譬如:单元、单元节点、边线和中心的相互关系是否有序,并且与它们的数据构成、排列是否具有对应性.有结构网格已经有久远的历史,在我们的《计算流体动力学》一书中也有简单的介绍.例如:初等函数和插值方法,代数方法和通过椭圆型或双曲型偏微分方程方法生成正交的贴体曲线网格,等等.本书限于篇幅和内容,将不进行关于这方面的讨论.有兴趣的读者,简单的情况可以参考我们的早期专著《计算流体动力学》.

9.1 Delaunay 三角形和 Delaunay 三角剖分[65,234,235]

首先介绍几个重要的概念,它们与非结构网格的发展历史和本节的讨论有密切的关系.这就是 Voronoi 凸多边形,Dirichlet (Tessellation)花纹和 Delaunay 三角形.

1. Voronoi 凸多边形

设在平面 R^2 上,给定了 N 个分离点 $\{P_j\}_1^N$.对每个点 $P_i(i=1,\cdots,N)$,规定其领域 (territory) 为:在该平面上到 P_i 点的距离比到其他点 $P_j(j\neq i)$的距离更近的点集

$$S_i = \{P \in R^2 : |PP_i| \leqslant |PP_{jk}|, j \neq i, j = 1,\cdots,N\}, \qquad (9.1)$$

该领域即为 P_i 点的 Voronoi 凸多边形.

显然,S_i 是由该节点 P_i 与其相临的节点的连线的垂直平分线所围成的凸多边形,该节点是这一凸多边形的惟一内节点.

由所有的 N 个离散点按照这种方式所形成的 Voronoi 凸多边形,与边界构成的这种区域分割图形,我们通常称之为 Voronoi 凸多边形区域.又称为 Dirichlet 或 tessellation 花纹.

2. Delaunay 三角形

连接相互临接的三个 Voronoi 凸多边形的惟一内节点所构成的三角形称为 Delaunay 三角形.将所有的凸多边形的惟一内节点连接,构成了区域的一个 Delaunay 三角形剖分.

事实上,Delaunay 三角形剖分和 Voronoi 凸多边形具有对偶性质.而且,所有三角形互不重叠,而又完全地覆盖整个数据节点的凸域.通过这种对偶性质,Sapidis 等人 1991 年给出了平面上任意区域的 Delaunay 三角形剖分.

随着计算机科学的发展,计算流体力学的需要,特别是 CAD、CAM 的发展,也由于有限元方法和有限体积方法的网格自动生成和自适应技术的要求,实现 Delaunay 三角形剖分的讨论日益活跃.不断地提出了各种生成方法和各种插点的准则和各种优化方案.

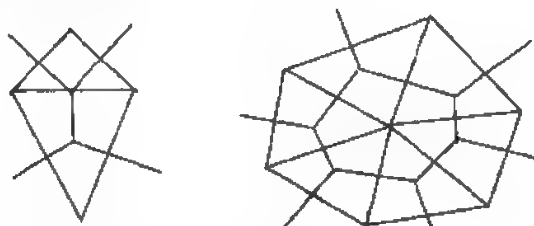


图 9.1 Delaunay 三角形和 Voronoi 凸多边形

3. Bowyer-Watson 的"circumcircle property"准则(简称 CP 准则)

早在 1981 年,Watson 就给出了 Delaunay 三角形剖分的算法[240],并且进行了初步的理论分析.在同一年,Bowyer 对于 Voronoi (Dirichlet) 花纹的计算机生成和数据结构的方案进行了讨论和实践[20].他们的 Delaunay 三角形剖分完全是根据所谓的"circumcircle property"准则(简称 CP 准则),或者称 Delaunay 三角形的外接圆准则:

在 Delaunay 三角形剖分中,任何一个三角形的外接圆中,除了该三角形的三个节点以外,不存在其他节点.

基于这种准则的 Delaunay 三角形剖分，事实是一种重连方法 (reconnection method). 也就是说，采用不断地插入节点的过程，实现 Delaunay 三角形剖分. 每当一个新节点插入后，如何去尽可能局部地调节已经存在的 Delaunay 三角形剖分网格.

如图 9.2 所示，通过 "CP 准则" 的检验，发现节点 A 破坏了几个 Delaunay 三角形的外接圆条件(图 9.2(a)). 我们将遭到破坏的三角形中邻近的边线去掉，产生一个凸域(图 9.2(b)). 重连节点 A 和该凸域的节点后，生成局部的新的一个三角形剖分(图 9.2(c)). 同时，我们应当对于相应的三角形剖分的数据结构进行相应地改造，记入新的剖分数据.

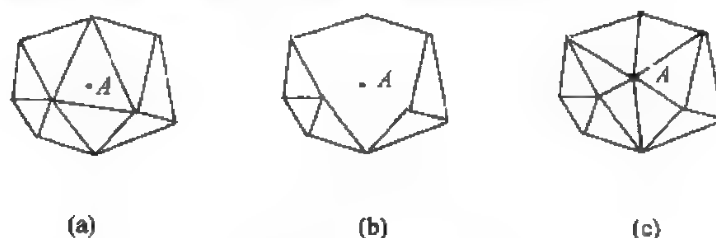


图 9.2 Bowyer-Watson 方法的插入点后的重连过程

问题是初始的网格剖分如何形成. 有几种方案：对于给定的数据节点点集的情况，可以构造包括所有节点的两个 Delaunay 三角形，由此出发，逐一顺序地插入所有的其他节点，并保持满足 CP 准则. 也可以首先对于所有节点进行预处理，即确定这些散乱数据节点的"重心"，而后由内向外，根据与"重心"的距离进行节点的逐一地插入.

如果已经给定了节点集的外边界节点，可以采用如下方案进行：首先做一个包括节点集的大矩形，以此矩形的对角线分成的两个三角形出发，逐一地插入节点. 最后清除联结大矩形四个角点的三角形，并且根据边界的外法向来消除多余的边界三角形.

如果利用比较简便的代数、插值等等方法，已经可以生成规则的有结构的网格. 在这种情况下，我们可以采用下面介绍的其他插入和重构的方法，进行改造生成非结构的一个 Delaunay 三角形剖分.

9.2 Rebay 的非结构网格生成算法[176]

Rebay 根据 Voronoi 凸多边形和 Delaunay 三角形剖分的关系，并且由"CP 准则"的特征，和预设的三角形剖分的"密度"指标，提出了两种 Delaunay 三角形剖分方案：Voronoi 角点插入型 (Voronoi-vertex point insertion method) 和

Voronoi 边线的节点插入型(Voronoi-segment point insertion method). 方法的基本思想是:

通过某种方式给出剖分区域上的三角形剖分的分布函数 $f(X)$,和当地三角元的外接圆半径 ρ_k(圆心在 X_k). 以下就是 Rebay 的网格生成算法:

(1) 通过一定的方法给出了一个初始的三角形分割:例如,首先分割边界确定边界节点,而后采用 Bowyer-Watson 方法作一个粗略的三角形分割.

(2) 根据是否包含区域边界线段,将三角元划分为两类:external 型和 internal型.

(3) 定义一个无量纲的判据量

$$\alpha_k = \frac{\rho_k}{f(X_k)}, \tag{9.2}$$

按照 α_k 的先大后小,对已有的 internal 三角元进行排序,并根据"CP 准则",分为 non-accepted 型的和 accepted 型的三角元. 后者是已经达到预设尺度的三角元.

(4) 对于 non-accepted 型的三角元,按照 α_k 排序,进行插入节点的操作. 首先判断是否是 external 型或者是边界外的三角元,若是则跳过. 如若不是,则插入节点. 并利用 Bowyer-Watson 的"CP 准则"和判据量,进行调节和改造.

具体的方案划分为:直接根据 Voronoi 多边形的形心插入节点方法(Voronoi-vertex point insertion method);沿着 Voronoi 的边线插入法(Voronoi-segment point insertion method). 特别是需要介绍后一种方法的实施过程. 如图 9.3 所示,左三角形为 external 型或者 accepted 三角元,而右为 non-accepted 型的,作者称为 active 三角元. X_k 为左三角形的外接圆心,X_r 为待求的插入节点,计算如下:

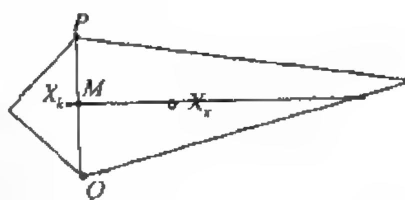


图 9.3 Rebay 的 Voronoi-segment point insertion 方法

$$X_r = X_m + d\hat{e} \tag{9.3}$$

其中 X_m 为两个三角形公共边的中点,$\hat{e}$ 为过该点的垂直平分线,即 Voronoi 多边形的边线右单位方向.

$$d = L - \sqrt{L^2 - p^2}, \quad p = \frac{1}{2}|PQ|,$$

$$L - |XM| = \min\left[\max(\rho_M, p), \frac{p^2 + q^2}{q}\right],$$

$$q = |X_M - X_K|,$$

$$\rho_M = f\ (X_M),$$
$$\vec{e} = \frac{X_M - X_K}{|X_M - X_K|}. \tag{9.4}$$

(5) 将新生成的三角形归入 internal 型和 accepted 型. 同时算出和记录它的 α_k.

(6) 对于三角剖分的数据结构进行相应的调节.

(7) 检验是否所有的三角元已经达到要求,即

$$\max_k \alpha_k \leqslant 1 \tag{9.5}$$

若是,结束. 否则继续执行 (4).

9.3　一个简单的任意二维区域三角形剖分的方法

这里,向读者介绍一个生成三角形剖分的简单方法,它常常可以作为非结构网格生成的一个初始形式. 其步骤如下:

假定需要进行三角形剖分区域的边界,是由某个线段集合

$$S = \{\overline{P_iQ_i}, i = 1,\cdots,N\}$$

组成. 事实上,一般的非结构网格的应用软件,在利用它的时候,应当给出等待三角形剖分的区域的这些边界的线段,以便标明由它们所构成的外边界(其走向是沿逆时针)和内部孔洞的边界(其走向是顺时针).

(1) 找出求解区域的 Y 方向的最大范围

$$[Y_{\min}, Y_{\max}].$$

(2) 在上述区域内,引入虚拟的 Y 方向层线. 这里要求保证任何两相临的层线间等于或者近似于区域内的平均单元尺度 D.

(3) 定水平层线

$$y = H$$

与区域边界的交点,即与边界线段集合的交点. 譬如,考虑线段$\overline{P_iQ_i}$,记

$$X_1 = X(P_i),\quad Y_1 = Y(P_i),\quad X_2 = X(Q_i),\quad Y_2 = Y(Q_i).$$

如果

(ⅰ) $(Y_1 - H)(Y_2 - H) < 0$ 或者

(ⅱ) $(Y_1 - H)(Y_2 - H) = 0$ 并且 $H > Y_1$或者 $H > Y_2$,则存在交点

$$S: \left(X_1 + \frac{(H - Y_1)(H - X_1)}{(Y_2 - Y_1)}, H\right). \tag{9.6}$$

否则,就不存在交点. 所以,水平层线与区域边界的交点必然是偶数的. 并且,将它们按照 X 方向的升序排列.

(4) 内节点的生成:要与边界点和已经存在的内节点至少有 0.7D 的距离.即如果(X,Y)是待求的内节点的坐标,首先检验是否满足

$$(X - P_l)^2 + (Y - Q_l)^2 < C^2, \quad C = 0.7D. \tag{9.7}$$

若是,则将它定为新的插入点.这一过程是沿着每一层线进行,直至一层结束后再进行到下一层线.并且,将刚刚完成的层线上的全部节点(包括区域边界和内节点),按照 X 方向的升序排列.

(5) 进行节点的三角形联结,构成一个初始的三角形剖分.

上述的初始三角形剖分方案比较简单、快捷,而且不破坏已经存在的节点和边界节点.当然也就显得粗糙.因而常常需要进行调节、优化,或者进行改造.

9.4 非结构网格生成的前沿追踪算法

1985 年 Lo 等人提出了一篇非常细致的构造非结构网格的论文[150]笔者认为它是迄今为止在生成非结构网格方面最具体的论文之一.他们所采用的方法是前沿推进方法(advancing front method 或者 front tracing method),Muller 等人称为 frontal approach.

1. 基本思想和过程

基本思想是非常简单的,这里我们干脆采用一个简单的例子进行说明.如图 9.4 所示,需要进行三角形剖分的矩形区域是 1－2－3－4.

首先进行边界的剖分,即产生边界节点,例如,1,5,6,2,7,8,3,9,10,4,11,12,13.内域的剖分,完全按照前沿推进方法生成.也就是说,内节点的插入开始是从边界节点"对",向内域开始.而后,就是沿着网格生成的前沿 Γ 的节点"对"向更深的内域进行.随着每一个新的三角元的构成,这个网格的前沿同时也随着向内域推进.于是在新的前沿,向前进方向(若开始从外边界,应当是逆时针方向;若是内边界,则是顺时针方向)进行下一个三角形的生成过程.以上述的矩形剖分为例:

(1) 如图 9.4,开始进行三角形剖分,譬如由左侧的 5,6 节点"对"向内找节点 14.确定 14 节点的方法也可以像上面的 (12.7) 式那样.我们在后面介绍新的方案.

(2) 不妨假定我们已经进行到如图 9.4(a)所示的前沿

$$\Gamma : 13 - 14 - 6 - 2 - 7 - 8 - 3 - 9 - 10 - 4 - 11 - 12 - 13$$

此时的节点"对"是

13	14	6	2	7	8	3	9	10	4	11	12	
14	6	2	7	8	3	9	10	4	11	12	13	

(3) 在新的前沿 Γ 出发.譬如利用节点"对"6—2,向内域找到节点 15.我们得到一个更新的前沿,如图 9.4(b):

$$\Gamma: 13-14-6-15-2-7-8-3-9-10-4-11-12-13$$

和更新的节点"对"

13	14	6		15	2	7	8	3	9	10	4	11	12	
14	6	15		2	7	8	3	9	10	4	11	12	13	

至于如何具体地由一个节点"对",确定下一个三角元的另一个顶点,下面我们将进行专门的讨论

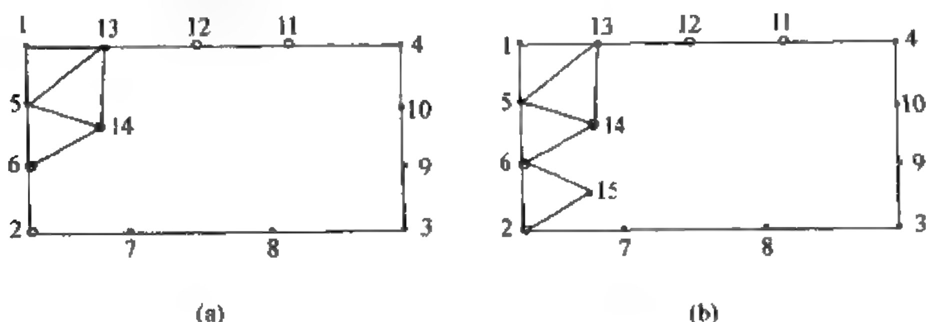


图 9.4 三角形网格剖分的前沿追踪(advancing front)方法

事实上,图 9.4(b) 的三角形剖分的前沿 Γ 应当是联结 14,15 节点.而不是 14,6,15 的锯齿状折线.因为一般情况下,其间不可能插入其他节点了.

2. 由节点"对"向内域搜索插入节点的方法和优化标准

不失一般性,考虑节点"对"$\overrightarrow{AB}\in\Gamma$,注意上面的尖头符号表示插入节点的行进方向.现在欲搜索一个内节点 $C\neq P_l$(l 表示所有的已经产生的边界和内节点),而且$\in\Omega$.欲使由以上三点 A,B,C 所构成的三角形具有某种意义上的优化形态.

如图 9.5 所示.假定所求的三角形为 ΔABC,节点 C 是搜索到的最后可能位置.根据 Lo 的优化意义,需要判断和检验优化指数

$$\alpha=\frac{S_{\Delta ABC}}{AB^2+BC^2+CA^2}, \tag{9.8}$$

其中三角形面积 $S_{\Delta ABC}=\dfrac{1}{2}\vec{AB}\times\vec{AC}$. α 值是应当尽可能地大.例如图 9.6 给出了几种比较典型的,可以接受的三角形.可见即使最好情况图 9.6(a) 的等边三角形,也只能保 $\alpha=0.1443$.

Muller 等人提出的判断标准是三角形的最小和最大的边长比

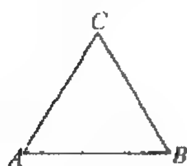
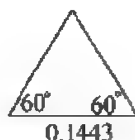


图 9.5 内节点 C 的搜索



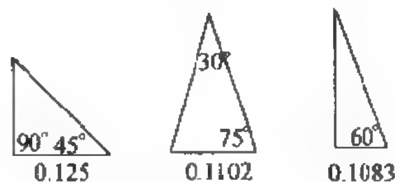


图 9.6 几种典型的三角形 α 值

$$\left(\frac{L_{\min}}{L_{\max}}\right)^2 = 0.366 : 0.5, \tag{9.9}$$

右端的 0.366 是在锐角三角形的极限许可值,0.5 是在钝角的极限许可情况. Muller 等人[165]认为 Delaunay 三角形剖分的过程,在极大的程度上取决于搜索三角形的节点,包括外接圆心,确定外接圆半径的效率.特别是在三维情况下的四面体剖分中,作者提出了搜索的"目标方向"的概念(target direction)和方案.作者进行了一个三维复合翼型的四面体单元剖分.发现边界的 Delaunay 三角形剖分过程,每个节点的平均耗时为 0.0016 秒(在 DEC5000),而对于搜索和确定内域节点的平均耗时为 0.0054 秒.其他的试验也有类似的情形.

3. 三角形剖分的事后处理和非结构问题

(1) 三角形剖分的事后处理

一般说来,三角形剖分过程结束后,所得到的非结构网格并不一定是 Delaunay 的,甚至可能出现在边界外的三角形,或者三角形的疏密也会有不满意的地方.所以需要进行剖分后的处理.通常习惯称为光滑过程(smoothing process after triangular).

方法的思想是简洁的:即根据 Delaunay 三角形剖分和 Voronoi 凸多边形的对偶关系.通过适当的调节内节点的位置到相应环绕该节点的 Voronoi 凸多边形中心上去(shifting each interior generated node to the center of the surrounding polygon).方法有多种:能量法;滤波法;位移法(shift method).

(2) 非结构网格的局部加密和减疏的问题

非结构网格一旦生成,初期网格的疏密也已经确定.在我们的实际计算和数值模拟过程中,由于问题随时间的发展,原来的网格疏密分布会逐渐不适应问题的特征.因而需要进行的局部插入内节点,即局部对于原来的网格加密;或者为了节省不必要的浪费,需要剔除某些节点,即局部减疏网格.这就是非结构网格的自适应技术问题.读者可以参考有关的文献.

9.5　介绍一个二维 Delaunay 三角形剖分生成非结构网格软件

1. 使用方法简介

作者是意大利 Trieste 大学的 B. Niceno 博士. 这是一个提供二维区域 Delaunay 三角形剖分的 C 语言程序. 共计有 2100 行. 能够对于由折线围成的多空洞、多介质区域，生成指定局部加密的 Delaunay 三角形剖分. 使用的方法和基本步骤是：

(1) 首先要在 C++ 或者 visual C 5.0 编辑器上生成执行程序 easymesh.exe. 注意，编辑的结果是生成三个文件 easymesh.dsp，~.ncb，~.plg 和一个子目录 debug. 而且在 debug 中生成七个文件，其中关键的是执行程序 easyMesh.exe.

(2) 然后，将等待进行三角形剖分的区域边界节点"链"(按逆时针顺序排列)、内部空洞边界节点"链"(按顺时针顺序排列)，介质分界线，需要局部加密的点、线、区等等目标和要求，逐一地编制输入(input)的数据文件filename.d .

MDOS 窗口下，运行 easymesh，采用下面的命令

C:\triangulation\debug >easymesh filename　[options]

结果生成四个 data 文件：三角单元 filename.e，节点坐标文件 filename.n，线元文件 filename.s，以及三角形剖分的 tecplot 图形数据文件 filename.t. 其中最后的文件可以用来直接在图形软件 tecplot7.0 上绘出区域的 Delaunay 三角形剖分图.

其中开关项 [option] 可以省缺. 若为 -d 就仅仅生成边界的三角形剖分. +dxf 则生成 Delaunay 三角形剖分和 Voronoi 凸多边形的对偶图形文件.

这里应当说明，tecplot7.0 是一个当前 PC 个人计算机上最好的数值计算和计算机模拟的绘图软件，特别是对于计算流体力学和偏微分方程数值解的研究工作，是难得的应用软件. 但是，目前还不是 free 的.

(3) 自行编制一个截取、分离上述数据文件中的有关数据的程序. 通过运行该程序来得到构成有限元方法，或者有体积方法需要的 data 数组.

读者可以通过国际互联网得到这个程序：niceno@univ.trieste.it.

2. 一个简单的例子

作为一个简单的例子，我们考虑如图 9.7 的内部含有孔洞的区域. 首先需要编制输入文件 example.d：

```
#----------------------------#
#          Example           #
#----------------------------#
```

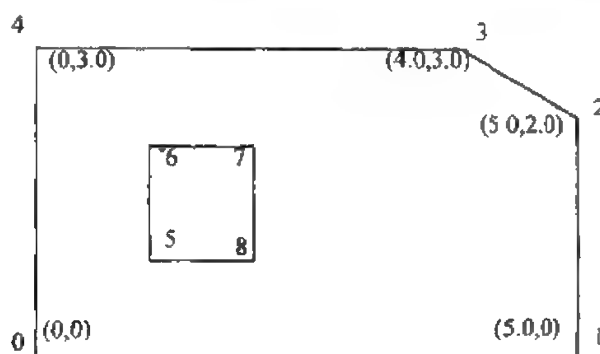


图 9.7 等待进行三角形剖分的区域

```
#---------------------------#
#         POINTS            #
#---------------------------#
 9                              # Number of points #
 0:  0.0  0.0   0.25   1        # The boundary nodes #
1:  5.0  0.0   0.25   2
2:  5.0  2.0   0.25   2
3:  4.0  3.0   0.25   3
4:  0.0  3.0   0.25   3
5:  1.0  1.0   0.1    4         # The nodes of interior hole #
6:  1.0  2.0   0.1    4
7:  2.0  2.0   0.1    4
8:  2.0  1.0   0.1    4
#---------------------------#
#        SEGMENTS           #
#---------------------------#
 9                              # Number of segments #
 0:  0  1   1                   # Boundary segments   #
 1:  1  2   2
 2:  2  3   2
 3:  3  4   3
 4:  4  0   3
 5:  5  6   4                   # Hole segments #
 6:  6  7   4
 7:  7  8   4
 8:  8  5   4
```

在输入文件中，节点的第四列指明三角元的边长、第五列和线段的第三列是标志值.

接下来在 MSDOS 下运行

easymesh example

我们得到：example.e，其中（对照图 9.8(a)的三角元结构，理解符号的意义）

- 第 1 行：<Number of elements>
- 其他行：<serial number> <i> <j> <k> <ei> <ej> <ek> <si><sj> <sk> <xV> <yV> <marker 或者 Sign>
- 末两行：注释

example.n，其中

- 第 1 行：<Number of nodes>
- 其他行：<serial number> <x> <y> <marker>
- 末两行：注释

example.s 为线元数据文件，其中（对照图 9.8(b)的一对三角元结构，理解符号的意义）

- 第 1 行：<Number of sides>
- 其他行：<serial number> <c> <d> <ea> <eb> <marker>
- 末两行：注释

其中的注释行，就是上面我们已经在各个数据文件中的“其他行”一栏所指(marker).

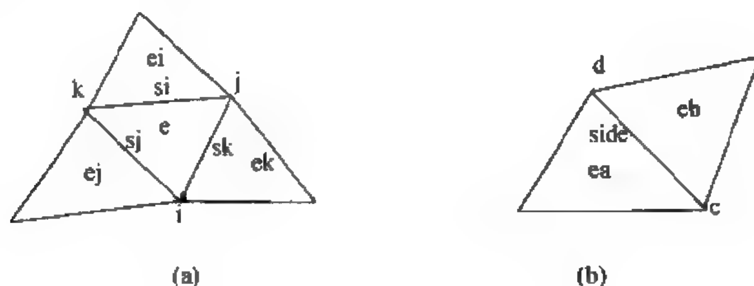


图 9.8　easymesh 的输出(output)文件 example.e 和 examp.e.s 的图解

最后，我们可以利用绘图文件 example.t 在 Tecplot7.0 上，通过打开这个数据文件直接得到非常漂亮的三角形剖分图，如图 9.9 所示.

当前，对于从事计算流体动力学，或者偏微分方程数值计算和数值模拟的研究及实际工作者来说，Tecplot7.0 是一个非常实用、有效的绘图软件. 但是，目前它还不是 free 的. 而我们这里介绍的二维非结构网格生成软件 EasyMesh

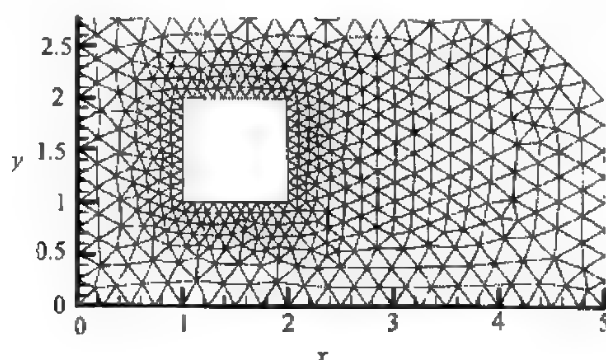


图 9.9 三角形剖分的结果

却是 free 的.

应当指出,在 example.e 三角形单元数据文件中,每一行有 13 列数据:

8: 4 6 9 13 9 5 17 16 12
4.976718248931231e-001 1.365972984309878e-001 1

冒号前的第 1 个数是三角单元的序号,2～4 列是三个节点的节点序号,5～7 列是三个相临单元的序号(注意,ei 单元是对向 i 顶点的),8～10 列是相应的三边的线元序号.11～12 列是三角单元的外接圆圆心的坐标值,它表示成双倍字长的浮点数.最后一列是标记,一般情况下,1 表示该单元是边界元,0 表示是内部单元.

在我们需要利用它们进行有限元方法,或者有限体积方法的数值计算前,必须将上述复合的数据进行分离和截取,生成三角单元、节点、线元的相应数组.简单的方法是利用 READ 语句,例如

```
C  Define arrays about elements
        NNODE(0: NE,0: 2)
        NELEMENT(0: NE,0: 2)
        NSIDE(0: NE,0: 2)
        XCIRCLE(0: Ne)
        YCIRCLE(0: Ne)
C  Open the outputfile example.e
       OPEN(10,file=example.e)
       READ(10,100)          # 跳过一行 #
       DO N=0, Ne
       READ(10,200)I, J, K, Ie, Je, Ke, Is, Js, Ks, X, Y
       NNODE(N, 0)=I
       NNODE(N, 1)=J
```

```
      NNODE(N, 2) = K
      NELEMENT(N, 0) = Ie
      NELEMENT(N, 1) = Je
      NELEMENT(N, 2) = Ke
      NSIDE(N, 0) = Is
      NSIDE(N, 1) = Js
      NSIDE(N, 2) = Ks
      XCIRCLE(N) = X
      YCIRCLE(N) = Y
      ENDDO
      CLOSE(10)
100   FORMAT(X5)
200   FORMAT(6X, 3(I 4,1X),1X,3(I 4,1X),1X,3(I 4,1X),1X,2
      (E21.17))
```

线元的输出数据文件 example.s 的每一行有六列.譬如

11:　　7　　3　　6　　−1　3

特别应当指出的是数据的第 4、5 列为线元两则的三角形单元序号,如果出现 −1,则表示这是边界线元.相应 −1 序号的三角形单元已经不存在,因为是区域边界外面.

其他的数据文件可以进行相似的讨论,这里就不再逐一地介绍了.另外,关于三维的四面体单元剖分和相应的问题,读者可以查阅我们后面列出的参考文献.

第十章 非结构网格有限体积法

事实上,前面讨论过的积分平均格式、TVD 方法,以及 ENO 和 Weighted ENO 方法中,也已经具有了有限体积法的许多思想,其中有的就是有限体积法.

一般的有限体积法不同于有限差分法之处,主要是它采用单元的离散,取单元中心值(通常是平均值),而不是单元节点值;它又不同于有限元法,避免了单元上插值函数的构造. 这样它具有有限元方法的网格剖分的灵活性,能逼近复杂的几何区域. 又具有有限差分方法在格式构造上的多样性,从而可以利用几乎所有差分方法的设计思路,以及相关的理论结果. 特别是它更具有了间断解的典型性质,可以认为在单元边界为间断,从而具有 Riemann 问题的特征. 这就是说在 FVM 方法中,我们更应该有间断解的观点.

看起来似乎问题变得复杂了,其实不然,它更体现了数值解的本质,因而使方法的适应性和效果都大为增强. 最近十几年来,特别是非结构网格的有限体积法的研究和应用已经取得长足的发展.

最早的有限体积法有效而实际的应用,当推 Patankar 和 Spalding 等人应用于传热和流体流的计算,读者可以参阅 Patankar[172]中译本,或者参见文献[220,231]. 而且他们沿着自己的思想方法建立了一整套的数值方法和软件,其中最著名的是混合格式、乘方格式、QUICK 和 SIMPLE 等格式.

在这一章中我们将通过一、二维守恒律方程问题、有源问题和对流—扩散问题,分别向读者介绍有限体积方法.

10.1 一维问题有限体积方法的讨论

一般的问题模型

$$u_t + f(u)_x = (\nu u_x)_x + S, \qquad (10.1)$$

其中,$f(u)$为流通量,其 Jacobi 矩阵 $a(u)$是 u 的连续函数,ν 是黏性系数或扩散系数,且 $\nu \geqslant 0$. S 是源项,它一般是未知函数 u 的函数,可以是间断的,如 Dirac 或 Heaviside 函数形式. 一般情况我们认为它是一个连续函数,可以有线性展开

$$S = \bar{S} + \alpha u. \qquad (10.2)$$

1. 一维守恒律的有限体积方法

首先进行无源项的讨论

$$u_t + f(u)_x = 0,\quad 0 < x < 1, t > 0. \tag{10.3}$$

取剖分 Δ: $x_0 = 0 < x_1 < \cdots < x_{I-1} < x_I = 1$. 函数在每个单元 $I_i = [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$上认为是常数,如积分平均形式所给,可以定义在单元的中心.

假定已知 $t = t_n$ 时间层的解

$$\{u_i^n : x \in I_i\}_{i=1}^I,$$

我们的目标是构造 FVM 格式,通过它计算

$$\{u_i^{n+1} : x \in I_i\}_{i=1}^I.$$

有限体积方法是积分形式的离散格式,首先是在控制元 I_i 上积分

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} u\,\mathrm{d}x + \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} f(u)\mathrm{d}x = 0$$

或者

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}u_i\Delta x_i + f(u(x_{i+1/2}, t)) - f(u(x_{i-1/2}, t)) = 0,$$

$$\Delta x_i = x_{i+1/2} - x_{i-1/2}. \tag{10.4}$$

在 TVD 和 ENO 两节里已经讨论过它的数值流量. 直接写出由 t_n 求出 t_{n+1} 时间层的形式

$$\left(\frac{\mathrm{d}u_i}{\mathrm{d}t}\right)_{t=t_n} = -\frac{1}{\Delta x_i}[\tilde{f}_{i+1/2} - \tilde{f}_{i-1/2}]. \tag{10.5}$$

这种半离散的形式,我们同样可以采用 Runge-Kutta 方法求解.

当然,也可以取全离散化形式,例如最简单的形式为

$$\frac{u_i^{n+1} - u_i^n}{\Delta t} = -\frac{1}{\Delta x_i}[\tilde{f}_{i+1/2} - \tilde{f}_{i-1/2}], \tag{10.6}$$

右端的 $\tilde{f}_{i+1/2}$为 t_n 时间层上构造的数值流通量,其具体形式前几节已有不同的讨论. 对于有限体积方法而言,它的构造依赖于剖分单元交界点 $x_{i+1/2}$的左、右两侧值($u_{i+1/2}^{+}, u_{i+1/2}^{-}$).

通过上述讨论,我们应注意到在边界处,只留下半个单元,即左边界$[x_0, x_{1/2}]$和右边界$[x_{I-1/2}, x_I]$,这时对格式的离散应与边界条件相结合.

2. 一维有源问题的 FVM[191]

进一步讨论方程含有源项

$$u_t + f(u)_x = S \tag{10.7}$$

的情况. 一般情况下,$S = S(u)$ 是可以线性化、利用它的近似表示. 如上式的 FVM 格式,在现在的情况下,为

$$u_i^{n+1} = u_i^n - \frac{\Delta t}{\Delta x_i}[\tilde{f}_{i+1/2} - \tilde{f}_{i-1/2}] + (a_i u_i^n + \bar{S})\Delta t. \tag{10.8}$$

应当注意,源项也能够引起格式性质的改变. 比如,破坏单调性和 TVD 特点或格式的稳定性条件等.

特别需要考虑的是奇性源项. 例如考虑模型方程

$$\begin{cases} u_t + au_x = \delta(x - \alpha_i), \\ u(x,0) = u^0(x), \end{cases} x \in R \tag{10.9}$$

有 Dirac 函数 $\delta(x-\alpha_i)$源项,或写成 Heaviside 函数形式

$$u_t + au_x = \frac{\mathrm{d}H_i(x)}{\mathrm{d}x}, H_i(x) = \begin{cases} 0, & x < \alpha_i, \\ 1, & x > \alpha_i, \end{cases} \tag{10.10}$$

容易证明有解析解

$$u(x,t) = \frac{H_i(x) - H_i(x - at)}{a} + u^0(x - at). \tag{10.11}$$

一般的间断源项,可表示为分段连续函数,可以用 Heaviside 函数叠加给出. 而且它们弱解的存在惟一性研究也有不少作者进行了讨论和分析.

再例如一种时间依赖的点源情况

$$u_t + au_x = g(t)\delta(x - \alpha), \tag{10.12}$$

它有解析解

$$u(x,t) = \begin{cases} u^0(x - at), & x < \alpha, x \geqslant \alpha + at, \\ \dfrac{1}{a}g\left(\dfrac{\alpha - (x - at)}{a}\right) + u^0(x - at), & \alpha \leqslant x < \alpha + at. \end{cases} \tag{10.13}$$

前面的 (10.13) 式的 FVM 构造要比 (10.9) 复杂得多. 读者可以对 (10.12) 进行讨论,并构造 FVM 格式作为练习.

有源情况的 FVM 格式的构造,应与物理问题背景相协调,格式设计应具有一致性(例如,格式的 upwind 性质,间断分解特性等).

3. 一维对流扩散问题的 FVM

考虑控制方程

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(au) = \frac{\partial}{\partial x}\left(\nu \frac{\partial u}{\partial x}\right), \tag{10.14}$$

我们通过对它的 FVM 的构造,介绍 Spalding 和 Patankar 所提出的指数格式和 quick 格式.

在控制元$[x_{i-1/2}, x_{i+1/2}] \times [t_n, t_{n+1}]$上积分上式,得

$$\begin{aligned} u_i^{n+1} = u_i^n &- \frac{\Delta t}{\Delta x_i}[\langle au \rangle_{i+1/2} - \langle au \rangle_{i-1/2}] \\ &+ \int_{t_n}^{t_{n+1}} \left[\left(\nu \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)_{i+1/2} - \left(\nu \frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)_{i-1/2}\right] \mathrm{d}t \end{aligned} \tag{10.15}$$

若只考虑一阶 upwind,即对流项采用 upwind 离散,而扩散项则采用半格点的中心差分逼近

$$
\begin{aligned}
u_i^{n+1} = u_i^n &- \frac{\Delta t}{\Delta x_i}\left[\bar{a}_{i+1/2}u_{i+1/2} - \bar{a}_{i-1/2}u_{i-1/2}\right] \\
&+ \frac{\Delta t}{\Delta x_i}\left[\nu_{i+1/2}\left(\frac{u_{i+1}^n - u_i^n}{\Delta x_i}\right) - \nu_{i-1/2}\left(\frac{u_i^n - u_{i-1}^n}{\Delta x_i}\right)\right],
\end{aligned}
\tag{10.16}
$$

其中

$$
u_{i+1/2}^n = \begin{cases} u_i^n, & \bar{a}_{i+1/2} > 0, \\ u_{i+1}^n, & \bar{a}_{i+1/2} \leqslant 0. \end{cases}
$$

这是输运项的所谓 donor-acceptor 的设计,也是在而后将要介绍的 VOF 等许多方法都采用的方式. 1979 年,Leonard 提出了二阶的 upwind 格式,如果 $\Delta x_i \equiv \Delta x = \text{const}$,格式为

$$
u_{i+1/2}^n = \left(\frac{1}{4} + \alpha\right)u_{i+1}^n + (1 - 2\alpha)u_i^n - \left(\frac{1}{4} - \alpha\right)u_{i-1}^n.
$$

取 $\alpha = 1/12$ 为 Leonard 格式,当 $\alpha = 1/8$ 即为 quick 格式.

乘方格式是 Patankar 等人提出的局部采用指数逼近所构造的格式. 如果不考虑间断存在和时间依赖的情况,方程为

$$
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(au) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\nu\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right),
$$

或引进中间变量 J

$$
\frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}x} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(au - \nu\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right) = 0, \tag{10.17}
$$

由控制元积分得

$$
J_{i+1/2} = J_{i-1/2},
$$

再通过局部的指数逼近,得到近似的指数格式,其中

$$
\begin{aligned}
J_{i+1/2} &= \bar{a}_{i+1/2}\left(u_i + \frac{u_i - u_{i-1}}{e^{p_{i+1/2}} - 1}\right), \\
p_{i+1/2} &= \frac{\bar{a}_{i+1/2}\Delta x_{i+1/2}}{\nu_{i+1/2}}, \delta x_{i+1/2} = \frac{1}{2}[\Delta x_i + \Delta x_{i+1}].
\end{aligned}
\tag{10.18}
$$

通常称 $p_{i+1/2}$ 为网格局部 Peclet 数. 这就是说网格交界面的函数值由指数给出. 由此得格式为

$$
\begin{cases}
a_i u_i = a_{i+1}u_{i+1} + a_{i-1}u_{i-1}, \\
a_{i+1} = \dfrac{\bar{a}_{i+1/2}}{e^{p_{i+1/2}} - 1}, \\
a_i = a_{i+1} + a_{i-1} + \bar{a}_{i-1/2} - \bar{a}_{i-1/2}.
\end{cases}
\tag{10.19}
$$

鉴于指数形式的不便,采用简单的 Taylor 展开代替,这就是 Patankar 等的混

合格式.

$$a_{i+1}=\frac{\bar{a}_{i+1/2}}{e^{p_{i-1/2}}-1}=\begin{cases}0, & p_{i+1/2}>2,\\ -\bar{a}_{i+1/2}, & \text{其他}.\end{cases} \tag{10.20}$$

在流体,传热和传质问题的计算中,许多国内外的工程技术人员采用乘方、指数、quick 和 simple 等的系列格式. 这些格式实际上也是 FVM 格式,不同的是局部的采用了指数或多项式的逼近形式. 从理论上讲,这些作者对 Riemann 问题间断分解函数 $u_{i+1/2}$采用了不同的构造形式. 尽管在理论上有这样或那样的不足和不严格,但它有实用效应,应用极为广泛.

在上述基础上,对于时间依赖问题的相应格式为

$$u_i^{n+1}=u_i^n-a_iu_i^n+a_{i+1}u_{i+1}^n+a_{i-1}u_{i-1}^n.$$

4. 一般情况下的 FVM 构造

对于 (10.1) 的一般情况,仍取控制元$[x_{i-1/2},x_{i+1/2}]$上的积分

$$\Delta x_i\frac{\mathrm{d}u_i}{\mathrm{d}t}=-\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}}\frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}x+\int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}}S\mathrm{d}x$$

则

$$\frac{\mathrm{d}u_i}{\mathrm{d}t}=-\frac{1}{\Delta x_i}[J_{i+1/2}-J_{i-1/2}]+\bar{S}_i, \tag{10.21}$$

其中

$$J_{i+1/2}=\left(f(u)-\nu\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}\right)_{i+1/2}. \tag{10.22}$$

由于 $x_{i+1/2}$是间断分解点,所以 $J_{i+1/2}$的通量计算需要考虑 Riemann 问题的解,尽管我们对于 $f(u)$的间断点的给定已有很多方式,但扩散项的给定并不熟悉. 例如,我们如果对 $f(u)$采用 Roe 解算子方法,那么相应的扩散项也应进行类似地构造;如果采用 ENO 形式,扩散项也要采用一阶差分的模板配置. 而且从 $J_{i+1/2}$的形式来看,如果我们的源项可以写成

$$S=\frac{\mathrm{d}Q}{\mathrm{d}x},$$

则源项也可以纳入 J 中一并讨论,一致地进行构造

$$J=-f(u)+\nu\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}x}+Q. \tag{10.23}$$

关于其他的间断分解,Roe、MUSCL 和 PPM,以及其他方法的构造,关键只是在单元边界处的函数值的近似构造问题,根据前面几节的讨论,读者自己已经不难提出解决的方案.

10.2　二维问题的 FVM 构造

一维的一种直接推广，就是二维空间正交矩形网格剖分的情况. 这种剖分的 FVM 的介绍可以在许多有关的参考书中找到，而且几乎完全是一维问题的直接开拓，无需深入讨论. 在这里仅仅就任意三角剖分，特别是非结构网格 Delauney 三角形剖分的情况，进行比较深入的讨论.

1. 体积控制元的选择

作网格剖分之后，就要根据问题的特点和需要来确定控制元. 控制元也称为控制体，这也是有限体积法名称的由来. 然后，在控制元上积分原方程并进行离散和数值计算. 控制元的类型有两种，一种是将单一的网格单元(这里我们选取的是三角元)作为控制元；另一种是将共角点的网格各取一部分合在一起作为控制元. 二维三角剖分的共角点的网格组合的控制元又分为：(1)统一型(图 10.1(a))；(2)垂心型(图 10.1(b))；(3)完全中心型(图 10.1(c))；(4)部分中心型(图 10.1(d)). 在二维情形，控制元可以统一描述为 $k(k\geqslant 3)$ 个顶点的多边形.

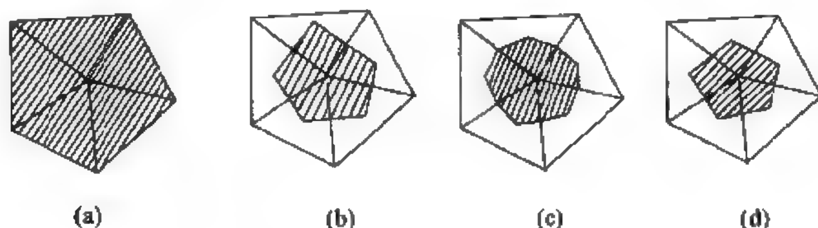


图 10.1　四种有限体积方法的控制元

2. 二维守恒律组的 FVM 构造

考虑守恒律问题

$$U_t + f(U)_x + g(U)_y = 0, \tag{10.24}$$

或者写成

$$U_t + \nabla\cdot F = 0,\ F = (f,g)^{\mathrm{T}},\ \nabla = \left(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{10.25}$$

Jacobi 矩阵

$$\frac{\partial f(U)}{\partial x} = a(U),\frac{\partial g(U)}{\partial y} = b(U). \tag{10.26}$$

设它们相应的实特征值和特征向量为

$$a(U):\qquad \lambda_i, V_i, i = 1,2,\cdots,m.$$
$$b(U):\qquad \mu_i, W_i, i = 1,2,\cdots,m. \tag{10.27}$$

在 Delauney 三角剖分的网格中，考虑节点中心型的一个典型控制元，如图 10.2 所示. O 点为共顶点，周围的三角形中心(一般为外接圆圆心)，按逆时针记序为 O_j，$(j=1,\cdots,6)$，各共顶点的边线中点记为 $P_j(j=1,\cdots,6)$. 连接中心 O_j 和中心 P_j 构成控制元，取方程(10.24)在控制元上的积分，得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega_0} U\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\partial\Omega_0} f\mathrm{d}y - g\mathrm{d}x = 0 \tag{10.28}$$

或者

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{\Omega_0} U\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \int_{\partial\Omega_0} \vec{F}\cdot\vec{n}\mathrm{d}s = 0. \tag{10.29}$$

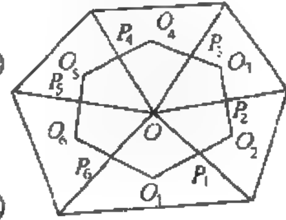


图 10.2 一个节点中心型的 FVM 控制元

(1)线积分(10.28)形式

为了数学推导的方便，我们可以重新安排 O_j，P_j 点，可用 $l=1,2\cdots,12$ 来标记，得 $\overline{O_1P_1}, \overline{P_1O_2}, \overline{O_2P_2}, \cdots, \overline{O_6P_6}, \overline{P_6O_1}$. 于是我们在连续或光滑的情况下，可以针对上述两种不同形式离散，有完全相同的效果. 现在分别进行讨论. 首先看(10.28)式，显然

$$A_0\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} = -\sum_{l=1}^{12}\left[\frac{1}{2}(f_{l+1}+f_l)(y_{l+1}-y_l) - \frac{1}{2}(g_{l+1}+g_l)(x_{l+1}-x_l)\right], \tag{10.30a}$$

其中 A_0 为控制元面积. 利用分部积分求和上式

$$\sum_{l=1}^{12}\frac{1}{2}[(f_{l+1}+f_l)(y_{l+1}-y_l) - (g_{l+1}+g_l)(x_{l+1}-x_l)]$$
$$= \sum_{l=1}^{12}\frac{1}{2}[f_l\Delta y_l - g_l\Delta x_l], \tag{10.31}$$
$$\Delta x_l = \frac{1}{2}(x_{l+1}-x_{l-1}), \Delta y_l = \frac{1}{2}(y_{l+1}-y_{l-1}).$$

上式又可改写为

$$A_0\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} = -\sum_{l=1}^{12}\frac{1}{2}[f_l\Delta y_l - g_l\Delta x_l]. \tag{10.30b}$$

考虑到

$$\sum_{l=1}^{12}\Delta y_l = \sum_{l=1}^{12}\Delta x_l = 0,$$

所以又可写为

$$A_0\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} = -\sum_{l=1}^{12}[(f_l - f_o)\Delta y_l - (g_l - g_o)\Delta x_l]. \tag{10.30c}$$

对于标量情况，若定义

$$a_l = \begin{cases} -\dfrac{(f_l - f_o)\delta y_l - (g_l - g_o)\delta x_l}{u_l - u_o}, u_l \neq u_o. \\ -\left(\dfrac{\partial f}{\partial u}\delta y_l + \dfrac{\partial g}{\partial u}\delta x_l\right)\Big|_{u=u_o}, u_l = u_o. \end{cases} \tag{10.32}$$

则(10.30)成为

$$\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{A_o}\sum_{j=1}^{k} a_j(u_j - u_o). \tag{10.33}$$

作为全离散格式，时间导数项采用向前差分离散，可得

$$\begin{aligned} u_o^{n+1} &= u_o^n + \frac{\Delta t}{A_o}\sum_{l=1}^{k}\alpha_l(u_l^n - u_o^n) \\ &= \left(1 - \frac{\Delta t}{A_o}\sum_{l=1}^{k} a_l\right)u_o^n + \frac{\Delta t}{A_o}\sum_{l=1}^{k}\alpha_l u_l^n. \end{aligned}$$

记 $c_0 = 1 - \dfrac{\Delta t}{A_o}\sum_{l=1}^{k} a_l, c_l = \dfrac{\Delta t}{A_o}\alpha_l$，即得

$$u_o^{n+1} = c_0 u_o^n + \sum_{j=1}^{k} c_j u_j^n.$$

若 $c_j > 0, (j = i, \cdots, k)$，则格式为正则格式．正则格式必为单调格式．

(2)法向量积分(10.29)形式

对于(10-29)形式，首先有

$$A_0\frac{\mathrm{d}U}{\mathrm{d}t} = -\sum_{l=1}^{12}(F \cdot n)_l \cdot \Delta l, \tag{10.34}$$

其中 n_l 为控制元的第 l 条边线上外法向单位向量，如 $l = \overline{O_lP_l}$ 的外单位法向为$(\cos\alpha_l, \sin\alpha_l)$．$\Delta l$ 为各折线边的长度．这种写法更有利于间断解问题的讨论和 FVM 格式的构造．控制元的边界面(线)都看作是间断的．正如一维问题在 $x_{i+1/2}$ 点的间断分解那样，实际上要计算 $U(x, y, t)$ 在这些边线上的值，需要首先求 $l = \overline{O_lP_l}$ 左右两侧的值，即(U_l^-, U_l^+)．

同样，也定义数值流通量

$$\widetilde{F}_{nl} = (F \cdot n)_l = (F \cdot n)(U_l^-, U_l^+),$$

并且满足数值通量的条件

(1) 相容性：$\widetilde{F}_{nl}(U, U) = F(U) \cdot n$

(2) 守恒性：$\widetilde{F}_{nl}(U^-, U^+) = \widetilde{F}_{-nl}(U^+, U^-)$

(3) Lipschitz 连续性．

(4) 单调性：$\widetilde{F}_{nl}(\uparrow, \downarrow)$，即对第一个变量不减，对第二变量不增．

最简单的情形是 $U_l^- = U_O, U_l^+$ 为右侧的共顶点的值，其中

$$U_O = \frac{\sum_{j=1}^{6} W_{O_j} U_{O_j}^n}{\sum_{j=1}^{6} W_{O_j}}, \tag{10.35}$$

$$W_{Oj} = \frac{1}{|O_jO|} = [(x_{O_j} - x_O)^2 + (y_{O_j} - y_O)^2]^{-1/2}.$$

其中 W_{O_j}为加权因子. 类似地求外侧顶点的值,这样构造的格式是一阶的.

二阶格式的构造方法很多,其中 Roe 平均解算子,upwind、Godunov 和 MUSCL 比较常用,而且讨论和研究的论文也很多. 关于 MUSCL 和二阶 upwind 格式,Pan(1993)[171]和 Tamamidis(1995)[219]给出了比较好的讨论,对于单个三角元情况,其中为了求 U_l, U_r,采用边线上的中点的 Taylor 展开形式,例如 U_l,首先在边线点向 O 点 Taylor 展开

$$U(x,y) = U(x_O, y_O) + (\varphi(\vec{r})\nabla U)_O \cdot \Delta\vec{r} + O(|\Delta\vec{r}|^2). \tag{10.36}$$

主要是如何给出$\nabla U|_{(x_O, y_O)}$的问题. 它的给出对于格式的精度,稳定性和高分辨率效果有很大关系,其中 $\varphi(r)$为适当选择的 limiter. 读者也可以参看 Jameson[110-112]的论文.

关于 Roe 型的构造用的更多,如 Deeminck 等人(1992)[64],以及后面关于对流-扩散问题的文章. 前者是结合了迎风和 Roe 参向量 Riemann 解算子方法.

限于篇幅,我们不可能逐一介绍,好在通过前几章的学习,读者已经可以自行构造和分析. 下面需要作几点注释.

(i) 前面的控制元取法是经典 FVM 的形式,事实上控制元的选择不必受局限. 为了方便实用,特别是编程和计算,边条件处理上的考虑,常用单一的控制元形式,如图 10.3 所示的中心三角形单元.

于是 FVM 格式为

$$A_0 \frac{dU}{dt} = -\sum_{j=1}^{3} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{n})_{l_j} l_j,$$

其中

$$\widehat{F}_{nl_j} = (F \cdot \vec{n})_{l_j} = (F \cdot n)(U_{l_j}^-, U_{l_j}^+)$$

的构造相应的简化,特别是间断解处理,求$(U_{l_j}^-, U_{l_j}^+)$的方法也得到简化. 例如在 l_1 边左右函数的二次 upwind 展开中

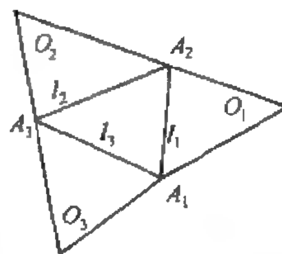


图 10.3 一个简单的三角形控制元

$$\nabla U | l_1^{\pm}$$

可以采用 $A_1, A_2, A_3, \cdots$ 或者 $O, O_2, O_3, \cdots$ 点的函数值进行不同的插值,加

权平均给出.

(ⅱ) 并非只能采用间断的概念去构造格式,由于不同的格式本身的数值耗散与数值色散的相互补偿和相抵,采用沿边界积分的高阶积分格式构造,同样可以得到很好的效果. 利用具有互补型的格式的交替作用,也可以达到完美的求解效果,最近 Liska 和 Wendroff(1999)[139]提出了将 L-W 格式与 L-F 格式交替使用,边线积分采用顶点值的梯形格式,汪继文和刘儒勋又成功地将其推广到无结构网格情况[236].

10.3 二维对流-扩散问题的 FVM

1. 一个不可压问题的分数步 FVM

我们这里讨论两类控制方程问题,同时也介绍了不同的处理方法. 第一种是具有压力校正的,第二种是一般的处理方式.

考虑黏性不可压流方程(采用重标记法)

$$\begin{cases}\dfrac{\partial u_i}{\partial t}+\dfrac{\partial}{\partial x_j}(u_iu_j)=-\dfrac{\partial p}{\partial x_i}+\dfrac{1}{\mathrm{Re}}\dfrac{\partial^2 u_i}{\partial x_j\partial x_j},\\[2mm] \dfrac{\partial u_i}{\partial x_i}=0,\qquad i=1,2\end{cases}\tag{10.37}$$

如图 10.2 为标准控制元. 采用分数步法(fractional steps method)进行上述方程的求解. 即写为

$$\begin{cases}\dfrac{1}{2}\dfrac{u_i^{n+1/2}-u_i^n}{\frac{1}{2}\Delta t}+\dfrac{\partial}{\partial x_j}(u_i^nu_j^n)=\dfrac{1}{\mathrm{Re}}\dfrac{\partial^2(u_i^n)}{\partial x_j\partial x_j},\\[2mm] \dfrac{1}{2}\dfrac{u_i^{n+1}-u_i^{n+1/2}}{\frac{1}{2}\Delta t}+\dfrac{\partial p^{n+1}}{\partial x_i}=0,\qquad i=1,2,\end{cases}\tag{10.38}$$

其中(14.38a)为第一步,由 t_n 时刻已知状态量,不计压力项的贡献,求中间过渡量 $u_i^{n+1/2}$;第二步由该过渡值求 t_{n+1}时刻的值,同时计入压力项的贡献. 为此,我们将(14.38b)式分别对 $x_i(i=1,2)$取偏微分,可得

$$\frac{1}{\Delta t}\frac{\partial u_i^{n+1}}{\partial x_i}-\frac{1}{\Delta t}\frac{\partial u_i^{n+1/2}}{\partial x_i}+\frac{\partial^2 p^{n+1}}{\partial x_i^2}=0.\quad i=1,2.$$

将两式叠加得

$$\frac{1}{\Delta t}\frac{\partial u_i^{n+1}}{\partial x_i}-\frac{1}{\Delta t}\frac{\partial u_i^{n+1/2}}{\partial x_i}+\frac{\partial^2 p^{n+1}}{\partial x_j\partial x_j}=0.$$

为了保持不可压流特征、对 $t=t_{n+1}$时刻强迫其满足不可压条件,即

$\partial u_i^{n+1}/\partial x_i = 0$，从而上式可写为 Poisson 方程

$$\frac{\partial^2 p^{n+1}}{\partial x_i^2} = \Delta p^{n+1} = \frac{1}{\Delta t}\frac{\partial u_i^{n+1/2}}{\partial x_i}. \tag{10.39}$$

于是我们有如下的计算步骤(为简单起见,记"*"代替"$n+1/2$",重写过程如下:

(1)已知 t_n 时刻的近似解(u_i^n, v_i^n, p_i^n).

(2)计算过渡量 u_i^*，由(10.38a),即

$$u_i^* = u_i^n - \frac{\Delta t}{A_O}\left[\int_{e_O}\frac{\partial}{\partial x_j}(u_i u_j)\mathrm{d}x\mathrm{d}y - \frac{1}{\mathrm{Re}}\int_{e_O}\frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j^2}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\right]. \tag{10.40}$$

(3)计算 p^{n+1}，由(10.39)式,即

$$\int_{e_O}\frac{\partial^2 p^{n+1}}{\partial x_i^2}\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \frac{1}{\Delta t}\int_{e_O}\frac{\partial u_i^*}{\partial x_i}\mathrm{d}x\mathrm{d}y. \tag{10.41}$$

(4)计算 u^{n+1}，由(10.38b)式,即

$$u_i^{n+1} = u_i^* - \Delta t\frac{\partial p^{n+1}}{\partial x_i}. \tag{10.42}$$

剩下的工作是计算控制元的积分,即(10.40)和(10.41)的右端积分.(10.40)式的右端积分项又可写为以下两项

$$\begin{aligned}&\int_{e_O}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(u_1 u_j - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial u_1}{\partial x_j}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\\ &= \int_{e_O}\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(u^2 - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(uv - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial u}{\partial y}\right)\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y,\end{aligned} \tag{10.43a}$$

$$\begin{aligned}&\int_{e_O}\frac{\partial}{\partial x_j}\left(u_2 u_j - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial u_2}{\partial x_j}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\\ &= \int_{e_O}\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(uv - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial v}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(v^2 - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial v}{\partial y}\right)\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y.\end{aligned} \tag{10.43b}$$

以第一式为例,利用 Green 公式,可化为沿控制元边线积分,即

$$\begin{aligned}&\int_{e_O}\left(\frac{\partial}{\partial x}\left(u^2 - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial u}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(uv - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial u}{\partial y}\right)\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}y\\ &= \int_{\partial e_O}\left(u^2 - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial u}{\partial x}\right)\mathrm{d}y - \left(uv - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial u}{\partial y}\right)\mathrm{d}x\\ &= \sum_{j=1}^{3}\left[\left(u^2 - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{l_j}^{*}(y_{A_{j+1}} - y_{A_j}) - \left(uv - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{l_j}^{*}(x_{A_{j+1}} - x_{A_j})\right],\end{aligned} \tag{10.44}$$

其中有(*)上标的值,需要根据不同方法和精度的要求,设计为沿 l_j 边线左右两侧的值的数值(复合)流向量. 若记

$$F_j^* = \left(u^2 - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{l_j}^*, \quad G_j^* = \left(uv - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial u}{\partial y}\right)_{l_j}^*, \tag{10.45a}$$

需理解为(如图 10.4 所示)

$$F_j^* = F(U_{l_j}^+, U_{l_j}^-)^*, G_j^* = G(V_{l_j}^+, V_{l_j}^-)^*, \tag{10.45b}$$

而

$$U = u^2 - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial u}{\partial x}, \quad V = uv - \frac{1}{\mathrm{Re}}\frac{\partial u}{\partial y}, \tag{10.45c}$$

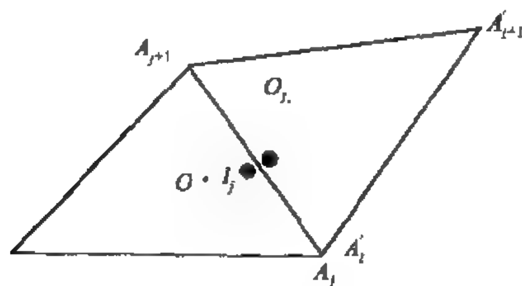


图 10.4　单元边线上的积分,以及左右值

构造 $U_{l_j}^{\pm}, V_{l_j}^{\pm}$ 的困难主要在于微分项,即$(\partial_x u)_{l_j}^{\pm}$,$(\partial_y u)_{l_j}^{\pm}$的计算. 下面我们主要进行它的讨论.

最简单的一阶格式,取左右三角元中心值,例如

$$F_j^* = \frac{1}{2}(U_O + U_{O_j}), \quad G_j^* = \frac{1}{2}(V_O + V_{O_j}). \tag{10.46}$$

例如考虑$\frac{\partial u}{\partial x}$项,即

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_O = \frac{1}{A_O}\int_{e_O}\frac{\partial u}{\partial x}\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \frac{1}{A_O}\int_{\partial e_O} u\mathrm{d}y = \frac{1}{A_O}\sum_{j=1}^{3}\frac{u_{j+1}+u_j}{2}(y_{A_{j+1}} - y_{A_j}),$$

$$\left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)_{O_j} = \frac{1}{A_{O_j}}\int_{e_{O_j}}\frac{\partial u}{\partial x}\mathrm{d}x\mathrm{d}y = \frac{1}{A_{O_j}}\int_{\partial e_{O_j}} u\mathrm{d}y = \frac{1}{A_{O_j}}\sum_{l=1}^{3}\frac{u_{l+1}+u_l}{2}(y_{A'_{l+1}} - y_{A'_l}),$$

这里的 l 表示 O_j 单元上的三个边线的序号,A'_l 表示 O_j 单元上的三个顶点的序号. 这就是说,为了计算偏微分项的边线 l_j 两侧的值,需要向外开拓一个三角元,利用这些三角元的围道积分进行分部求和计算,这并没有带来很大的工作量.

如果要二阶的精度,则上述的计算,需要引入边线上左右侧的 Taylor 展开形式,如

$$\begin{aligned} U_{l}^- &= U_O + \varphi(r)\nabla U|_O \Delta r^-, \\ U_{l_j}^+ &= U_{O_j} + \phi(r)\nabla U|_{O_j}\Delta r^+, \end{aligned} \tag{10.47}$$

梯度$\nabla U|_O$或$\nabla U|_{O_j}$的计算比较复杂.

压力方程的计算可以类似地进行讨论. 不过应当指出,对于压力校正方程的计算,其控制元可以采用不同的取法,也可以将压力值放置在三角元的顶点上,而不是放在元的中心. 这种作法,就是非一致分布的方案. 不过计算要复杂和繁琐.

关于这方面的讨论读者参见文献.

2. 二维浅水波问题的复合型 FVM 方案

如果采用向量守恒形式的记法,一般的对流-扩散方程可写为

$$U_t + \nabla \cdot F = S, \tag{10.48a}$$

$$\begin{gathered} U = (u_1, u_2, u_3)^{\mathrm{T}},\ F = (f^I - \nu f^{II}, g^I - \nu g^{II})^{\mathrm{T}}, \\ f^{II} = f^{II}(U_x),\ g^{II} = g^{II}(U_y). \end{gathered} \tag{10.48b}$$

例如对于二维的一般浅水方程

$$U = \begin{pmatrix} h \\ uh \\ vh \end{pmatrix},\ f^I = \begin{pmatrix} uh \\ u^2h + \frac{1}{2}gh^2 \\ uvh \end{pmatrix},\ g^I = \begin{pmatrix} vh \\ uvh \\ v^2h + \frac{1}{2}gh^2 \end{pmatrix},$$

$$f^{II} = \begin{pmatrix} 0 \\ hu_x \\ hv_x \end{pmatrix},\ g^{II} = \begin{pmatrix} 0 \\ hu_y \\ hv_y \end{pmatrix},\ H = \begin{pmatrix} 0 \\ -gh(S_{fx} + S_{Ox}) + hC_f v \\ -gh(S_{fy} + S_{Oy}) - hC_f u \end{pmatrix} \tag{10.49}$$

其中h, u, v分别为水深和x, y方向的水速,g是重力加速度,(S_{O_x}, S_{O_y})为河道的倾斜效应项,x, y下标也是求导的意思. C_f为 Coriolis 参数.

考虑由多边形构成的控制元e,在其上进行(10.48)式的积分,并利用 Green 公式得

$$\frac{\partial}{\partial t}\int_e U\mathrm{d}x\mathrm{d}y + \oint_{\partial e} F \cdot \vec{n}\mathrm{d}s = \int_e H\mathrm{d}x\mathrm{d}y, \tag{10.50}$$

其中

$$\vec{F} \cdot \vec{n} = (f^I - \nu f^{II})n_x + (g^I - \nu g^{II})n_y. \tag{10.51}$$

一般的 Roe 型 FVM 方法可写为

$$A_O \frac{\partial U}{\partial t}\Big|_O = -\sum_{j=1}^{J}(F \cdot n)_{l_j}|l_j|, \tag{10.52a}$$

其中

$$(F \cdot n)_{l_j} = \frac{1}{2}\{(F \cdot n)(U_{l_j}^-) + (F \cdot n)(U_{l_j}^+)$$

$$-\left|\frac{\partial(F\cdot n)}{\partial U}\right|_{l_j}(U_{l_j}^{+}-U_{l_j}^{-})|,\tag{10.52b}$$

其中 $(F\cdot n)$，$\frac{\partial(F\cdot n)}{\partial U}$ 的定义，我们在第七章中已经讲述．这里比较困难的是 f^{H}，g^{H} 的处理，即

$$f^{H}(U_{l_j}^{\pm}),g^{H}(U_{l_j}^{\pm})$$

的处理．读者通过前面的讨论，可以找到适当而合理的方法．在一阶格式情况，只能采用偏差分代替微分．有兴趣进一步了解有限体积方法的发展情况，以及得到更多的参考文献，读者可以参考文献[231,171,220,13,59]．

练习题

1．证明(10.12)+(10.9)的解为(10.13)．

2．构造(10.12)或(10.9)的FVM并讨论他们的收敛性．

3．作为数值算例，采用FVM方法计算以下问题：

[例1]
$$\begin{cases}u_t+\left(\frac{u^2}{2}\right)_x=\sin(\pi t)\delta(x-0.2)\quad x\in[0,1],\\ u(x,0)=0,\\ u(0,t)=0.\end{cases}$$

[例2]
$$\begin{cases}u_t+u_x=\sin(\pi t)\delta(x-0.1),\ x\in[0,1],\\ u(x,0)=0,\\ u(0,t)=0.\end{cases}$$

4．采用二维浅水波方程的复合形式FVM，计算二维溃坝问题的模型．

五、非标准有限元方法篇

从现在开始,我们将利用四章的篇幅向读者介绍几种重要的非标准的有限元方法,这就是混合元(mixed FEM)、运动元(moving FEM)、时空元(space-time FEM)和间断 Galerkin 有限元(discontionuous Galerkin FEM)方法. 由于这几种有限元方法在当代的有限元理论研究,特别是在科学与工程计算中的重要作用,已经受到广泛的注意和采用.

第十一章　混合有限元方法简介

混合有限元方法是一种基于限制,或者约束条件的变分形式的有限元方法. 混合有限元法的一般理论是由 Babuska 和 Brezzi 于 20 世纪 70 年代初创立的,其主要结果就是所谓的 B-B 条件[9,24]. 80 年代初,Falk 和 Osborn 提出了一种改进的方法[71],扩展了混合有限元方法的适应性.

混合有限元方法的优点是通过引入中间变量(一般它们也具有实际的物理意义),可以将高阶微分方程降阶,从而也就能够降低有限元空间的光滑性要求. 例如像 Burgers,KdV,RLW,KdV-Burgers 方程和双调和方程等,通过降阶使有限元插值空间简化,同时可以求到一些有意义的中间变量,方法也因而方便和容易实现.

这一章里我们仅仅是对混合有限元进行简单的介绍.

11.1　混合变分问题简例[152,178]

1. 简单的 Laplace 边值问题

首先考察边值问题

$$-\Delta u = f, x = (x_1, \cdots, x_n) \in \Omega \subset R^n,$$
$$u = g, \partial\Omega. \tag{11.1}$$

一般 Galerkin 有限元法的弱解变分问题是:求一个函数 $u \in H^1$ 使得满足

$$a(u,v) = l(v),\ \forall v \in H_0^1.$$

$$a(u,v) = \int_\Omega \nabla u \cdot \nabla v \mathrm{d}x, l(v) = \int_\Omega fv \mathrm{d}x$$

$$u = g,\ \partial\Omega. \tag{11.2}$$

或者先采用齐次化,再建立 Galerkin 有限元法的弱解变分问题. 根据 Lax-Milgram 定理,也容易证明弱解问题的存在惟一性. 由这种弱解问题出发,进行有限元的单元逼近,实现有限元的求解.

混合元方法则不同,其最大的特点是引入中间变量降低问题的解空间的光滑度,建立"联立"的变分问题.

引入 $p=\mathrm{grad}u=\nabla u$,从而问题(11.1)转化为

$$\begin{aligned} &p - \mathrm{grad}u = 0,\ i = 1,\cdots,n,\ x \in \Omega,\\ &\mathrm{div}\ p + f = 0,\ x \in \Omega,\\ &u\mid_{\partial\Omega} = g, \end{aligned} \tag{11.3}$$

上述两式分别乘以实验函数 $q_i(i=1,\cdots,n)$; v,在区域上积分. 利用分步积分和 Green 公式. 最后得

$$\int_\Omega \sum_{i=1}^n p_i q_i \mathrm{d}x + \int_\Omega u \sum_{i=1}^n \frac{\partial q_i}{\partial x_i}\mathrm{d}x = \int_{\partial\Omega} g \sum_{i=1}^n q_i \cos(\nu, x_i)\mathrm{d}s,$$

$$\int_\Omega v \sum_{i=1}^n \frac{\partial p_i}{\partial x_i}\mathrm{d}x = -\int_\Omega v f \mathrm{d}x,$$

其中 ν 为$\partial\Omega$ 的单位外法向.

如果我们引进符号

$$\begin{aligned} &p = (p_1,\cdots,p_n),\quad q = (q_1,\cdots,q_n),\\ &a(p,q) = \int_\Omega p\cdot q\mathrm{d}x = \int_\Omega \sum_{i=1}^n p_i q_i \mathrm{d}x,\\ &b(u,q) = \int_\Omega u\cdot \mathrm{div}\ q\mathrm{d}x = \int_\Omega u \sum_{i=1}^n \frac{\partial q_i}{\partial x_i}\mathrm{d}x,\\ &g(q) = \int_{\partial\Omega} g\sum_{i=1}^n q_i \cos(\nu, x_i)\mathrm{d}s,\\ &l(v) = -\int_\Omega f v\mathrm{d}x, \end{aligned} \tag{11.4}$$

同时定义函数空间 $H(\mathrm{div},\Omega)$和它的范数

$$\begin{aligned} &H(\mathrm{div},\Omega) = \{p : p \in (H^1(\Omega))^n, \mathrm{div}\ p \in L^2(\Omega)\},\\ &\|p\|^2_{H(\mathrm{div},\Omega)} = \|p\|^2_{0,\Omega} + \|\mathrm{div}\ p\|^2_{0,\Omega}, \end{aligned} \tag{11.5}$$

其中 $H^1(\Omega)$为 Sobolev 空间. 并简记

$$H \equiv H(\mathrm{div},\Omega),\quad V \equiv L^2(\Omega), \tag{11.6}$$

于是,我们可以得到(11.3)的混合元变分问题

$$\begin{aligned} &\text{Find } (u,p) \in V\times H \text{ such that},\\ &a(p,q) + b(u,q) = g(q),\ \forall q \in H, \end{aligned}$$

$$b(v,p) = l(v),\ \forall v \in V. \tag{11.7}$$

2. 常系数 Burgers 方程

考虑简单的一维 Burgers 方程问题

$$\begin{aligned} &u_t + Vu_x = \nu u_{xx},\ V = \text{const} > 0, \\ &u(x,0) = u_0(x), \\ &u(0,t) = u(1,t) = 0, \end{aligned} \tag{11.8}$$

利用通常的有限元方法，一般要求一阶光滑的有限元空间，换句话说其单元插值基函数(型函数)需二阶多项式. 混合有限元方法则采用引入中间变量的方式进行. 一种方案是

$$p = u_x, \qquad \int (p - u_x) q \mathrm{d}x = 0, \forall q,$$

$$u_t + Vp = \nu p_x, \quad \int (u_t + Vp - \nu p_x) v \mathrm{d}x = 0, \forall v$$

另一种方案是引入辅助函数

$$\sigma = \nu u_x - Vu, \tag{11.9}$$

从而(11.8)即为

$$\begin{aligned} &\sigma - \nu u_x + Vu = 0, (x,t) \in (0,1)\times(0,T), \\ &u_t - \sigma_x = 0, (x,t) \in (0,1)\times(0,T), \\ &u(0,t) = u(1,t) = 0, \\ &u(x,0) = u_0(x),\ x \in (0,1), \end{aligned} \tag{11.10}$$

和定义函数空间

$$V \equiv H_0^1(0,1), X \equiv L^2(0,1), \tag{11.11}$$

其中，$H_0^1(0,1)$为第二类 Sobolev 空间. 原问题转化为求$(u,\sigma) \in V \times X$，使得对$\forall t \in (0,T)$满足

$$\begin{aligned} &a(\sigma,\tau) - \nu b(u,\tau) + Va(u,\tau) = 0, & \forall \tau \in X, \\ &(u_t, v) + b(v,\sigma) = 0, & \forall v \in V, \\ &u(x,0) = u_0(x), & x \in (0,1), \end{aligned} \tag{11.12}$$

其中

$$\begin{aligned} a(\sigma,\tau) &= (\sigma,\tau) = \int_0^1 \sigma\tau \mathrm{d}x, \\ b(v,\sigma) &= (v_x,\sigma) = \int_0^1 v_x \sigma \mathrm{d}x, \end{aligned} \tag{11.13}$$

前面的(11.7)和(11.12)称为混合变分问题. 这种变分形式是过去标准有限元方法所不曾见到的. 它们有显而易见的已经提到过的好处；同时也给

问题的存在惟一、误差估计,以及单元的结构、有限元空间理论等等引进了一系列理论问题和实施问题.

11.2　混合变分问题和混合有限元的存在惟一性[174,152,43]

1. 混合变分问题的存在惟一性

在这里我们不想严格地进行理论的分析和论证,只是简单地介绍混合变分问题的 Babuska-Brezzi 存在惟一性条件(简称 B-B 条件). 这是一个类似标准有限元变分的 Lax-Milgram 定理存在惟一性定理.

定理 11.1　对于混合变分问题(11.7),如果$\partial\Omega$ 是 Lipschitz 连续,$f\in L^2(\Omega)$. 并且

(1)　$a(p,q):H\times H\to R$ 为双线性连续算子,且 H 椭圆的,即存在 $\alpha>0$ 使得

$$a(q,q)\geqslant \alpha\|q\|_H^2,\ \forall q\in H. \tag{11.14}$$

(2)　$b(u,q):V\times H\to R$ 为双线性连续算子. 且满足 B-B 条件,即存在 $\beta>0$ 使得

$$\sup_{q\in H}\frac{b(v,q)}{\|q\|_H}\geqslant \beta\|v\|_v,\ \forall v\in V. \tag{11.15}$$

(3)　$l(v)$,$g(q)$分别为其域上的线性有界算子.

则混合变分问题(11.7)有解且惟一.

关于混合变分问题(11.12)的讨论,我们将放在非线性 Burgers 方程的情况进行.

2. 混合元方法的简单讨论

对于混合变分问题(11.7),首先进行解域的单元剖分,即

$$\bar{\Omega}=\bigcup_{\kappa\in T_h}\kappa, \tag{11.16}$$

其中任一 κ 都是非空多面体单元;若 $s=\kappa_1\cap\kappa_2\neq 0$,两个相连的单元 $\kappa_1,\kappa_2\in T_h$ 具有公共侧面 s;并记 $\mathrm{diam}(\kappa)\leqslant h$, $\forall\kappa\in T_h$.

构造单元上的插值逼近,即构造有限元子空间 $V_h\in V$, $P_h\in H$. 于是混合有限元问题的提法为

$$\begin{aligned}&\mathrm{Find}(u_h,p_h)\in V_h\times P_h:\\&a(p_h,q_h)+b(u_h,q_h)=g(q_h),\forall q_h\in P_h,\\&b(v_h,p_h)=l(v_h),\forall v_h\in V_h,\end{aligned} \tag{11.17}$$

上述混合有限元问题解的存在惟一性,也有离散的 B-B 条件保证.

定理 11.2 (离散 B-B 条件,又称相容条件)如果 V_h, P_h 满足下面的相容条件,即存在 $\beta_h > 0$ 使 $\forall v_h \in V_h$,

$$\sup_{\substack{q_h \in P_h \\ q_h \neq 0}} \frac{b(v_h, q_h)}{\|q_h\|_{P_h}} \geqslant \beta_h \|v_h\|_{V_h}, \forall v_h \in V_h, \tag{11.18}$$

则(11.7)有惟一解.

3. 混合元的离散代数方程组

不妨设

$$\begin{aligned} P_h &= \mathrm{span}\{\psi_1, \cdots, \psi_N\}, \\ V_h &= \mathrm{span}\{\varphi_1, \cdots, \varphi_M\}, \end{aligned} \tag{11.19}$$

从而可以记

$$\begin{aligned} p_h &= \sum_{i=1}^{N} p_j \psi_j, \forall q_h \in P_h, \text{取 } q_h = \psi_i, i = 1, \cdots, N, \\ u_h &= \sum_{m=1}^{M} u_m \varphi_m, \forall v_h \in V_h, \text{取 } v_h = \varphi_k, k = 1, \cdots, M, \end{aligned} \tag{11.20}$$

于是(11.17)有离散化形式,即

$$\begin{aligned} &\sum_{j=1}^{N} p_j a(\psi_j, \psi_i) + \sum_{m=1}^{M} u_m b(\varphi_m, \psi_i) = g(\psi_i), \quad i = 1, \cdots, N, \\ &\sum_{j=1}^{N} p_j b(\psi_j, \varphi_k) = l(\varphi_k), \quad k = 1, \cdots, M, \end{aligned} \tag{11.21}$$

又若引入记号

$$a_{ij} = a(\psi_j, \psi_i),\ b_{im} = b(\psi_i, \varphi_m),$$
$$g_i = g(\psi_i),\ f_k = l(\varphi_k),$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1N} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{N1} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix}_{N\times N}, B = \begin{pmatrix} b_{11} & \cdots & b_{1M} \\ \vdots & & \vdots \\ b_{N1} & \cdots & a_{NM} \end{pmatrix}_{N\times M}, \tag{11.22}$$

$$p = \begin{pmatrix} p_1 \\ \vdots \\ p_N \end{pmatrix}, u = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_M \end{pmatrix}, g = \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_N \end{pmatrix}, f = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_M \end{pmatrix}.$$

则有离散的矩阵形式

$$\begin{aligned} Ap + Bu &= g. \\ B^{\mathrm{T}} p &= f. \end{aligned} \tag{11.23}$$

显然,如果 A^{-1}存在,我们可以由第一式解出 $p=A^{-1}(g-Bu)$,代入第二式得 $B^{\mathrm{T}}A^{-1}Bu=B^{\mathrm{T}}A^{-1}g-f$. 从而有混合元离散代数方程组的等价复合形式

$$Ku = F,\quad K = B^{\mathrm{T}}A^{-1}B,\quad F = B^{\mathrm{T}}A^{-1}g - f \tag{11.24}$$

由此可以进一步看到混合有限元方法特别适合高阶方程的定解问题,如双调和方程,也适应于黏弹性问题,扩散问题和对流-扩散问题. 在求其原函数的同时也得到了它的梯度,这对于应力-应变问题、挠度问题是非常有利的. 此外,比起一般有限元来,混合元方法的系统误差一般比较微小. 当然,我们也看到:构造混合有限元的解空间的工作有更多的困难,代数方程的解相对也更复杂.

11.3　非线性 Burgers 方程的混合元方法[152,174]

1. Gronwall 引理

在有限元方法的理论分析,特别是误差分析和模估计中,Gronwall 引理的连续和离散形式是非常重要的工具.

Gronwall 引理　设 $g(t)\in L^1([t_0,t_1])$非负,若 $\psi,f\in C^0([t_0,t_1])$,且满足不等式

$$\psi(t)\leqslant f(t)+\int_{t_0}^{t}g(\tau)\psi(\tau)\mathrm{d}\tau,\quad \forall\, t\in[t_0,t_1], \tag{11.25}$$

则 $\psi(t)$也满足

$$\psi(t)\leqslant f(t)+\int_{t_0}^{t}g(s)f(s)\exp\left(\int_{s}^{t}g(\tau)\mathrm{d}\tau\right)\mathrm{d}s,\quad \forall\, t\in[t_0,t_1]. \tag{11.26}$$

并且,如果 $g(t)$是非减的,又有

$$\psi(t)\leqslant f(t)\exp\left(\int_{t_0}^{t}g(\tau)\mathrm{d}\tau\right),\ \forall\, t\in[t_0,t_1]. \tag{11.27}$$

证明　令

$$R(t)=\int_{t_0}^{t}g(\tau)\psi(\tau)\mathrm{d}\tau,$$

利用(11.25),我们有

$$\frac{\mathrm{d}R(t)}{\mathrm{d}t}=g(t)\psi(t)\leqslant g(t)[f(t)+R(t)]. \tag{11.28}$$

从而

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[R(t)\exp\left(-\int_{t_0}^{t}g(\tau)\mathrm{d}\tau\right)\right]=\left[\frac{\mathrm{d}R(t)}{\mathrm{d}t}-R(t)g(t)\right]\exp\left(-\int_{t_0}^{t}g(\tau)\mathrm{d}\tau\right).$$

$$\leqslant g(t)f(t)\exp\left(-\int_{t_0}^{t}g(\tau)\mathrm{d}\tau\right).$$

在$[t_0,t]$上积分上式得

$$R(t)\exp\left(-\int_{t_0}^{t}g(\tau)\mathrm{d}\tau\right)\leqslant\int_{t_0}^{t}g(s)f(s)\exp\left(-\int_{t_0}^{t}g(\tau)\mathrm{d}\tau\right)\mathrm{d}s,$$

即

$$R(t)\leqslant\int_{t_0}^{t}g(s)f(s)\exp\left(\int_{s}^{t}g(\tau)\mathrm{d}\tau\right)\mathrm{d}s,$$

再结合(11.28)式可导出(11.26).

如果 $g(t)$是非减,则有

$$\psi(t)\leqslant f(t)\left[1+\int_{t_0}^{t}g(s)\exp\left(\int_{s}^{t}g(\tau)\mathrm{d}\tau\right)\mathrm{d}s\right],\quad\forall t\in[t_0,t_1],$$

因而也就有(11.27)式.

在下面我们将用到 Gronwall 引理的特殊情形,写作

推论 在上述引理中,若 $c=\mathrm{const}\geqslant0$,且

$$0\leqslant\psi(t)\leqslant c+\int_{0}^{t}g(\tau)\psi(\tau)\mathrm{d}\tau,\quad\forall t\in[0,t_1],\tag{11.29}$$

则 $\psi(t)$也满足

$$0\leqslant\psi(t)\leqslant c\exp\left(\int_{0}^{t}g(\tau)\mathrm{d}\tau\right),\forall t\in[0,t_1],\tag{11.30}$$

当 $c=0$ 时,$\psi(t)\equiv0$.

离散形式的 Gronwall 引理,读者可以参见专著[174].

2. 非线性 Burgers 方程的混合元方法

考虑下面的非线性 Burgers 方程定解问题

$$\begin{aligned}&u_t+auu_x-\nu u_{xx}=0,\quad(x,t)\in\Omega\times(0,t_1),\\&u(x,0)=u_0(x),\qquad x\in\Omega,\\&u(x,t)=0,\qquad(x,t)\in\partial\Omega\times(0,t_1),\end{aligned}\tag{11.31}$$

其中,$a=\mathrm{const}>0,\Omega=(a,b)$. 该问题的解如果存在且惟一,它的混合变分问题也不难得到

$$\begin{aligned}&\text{Find}\quad(u,p):[0,t_1]\to M\times X:\text{such that }\forall t\in(0,t_1),\\&(u_t,v)-(p,v_x)=0,\qquad\forall v\in M,\\&(p,\tau)+\nu(\tau,u_x)-a(u^2,\tau)/2=0,\forall\tau\in X,\end{aligned}$$

$$u(x,0) = u_0(x), \qquad x \in \Omega, \tag{11.32}$$

这里的辅助函数是

$$p = au^2/2 - \nu u_x, \tag{11.33}$$

解空间 $M = H_0^1(\Omega), X = L^2(\Omega)$. 混合变分问题的惟一性有

定理 11.3 若 $\varphi(x) \in L^2(\Omega)$,则混合变分问题(11.32-33)的解存在惟一. 而且存在 M_0 使得

$$|||u|||_{0,\infty} = \sup_{0 \leqslant t \leqslant t_1} \|u\|_{0,\infty} \leqslant M_0. \tag{11.34}$$

证明 由于问题(11.31)解 u 存在惟一,则

$$(u, p) = (u, au^2/2 - \nu u_x), \tag{11.35}$$

也是混合变分问题(11.32-33)的一个解. 在混合变分问题(11.32-33)中取 $v = u, \tau = u_x$ 联立解之,且注意利用分部积分和定解问题的边值条件,我们有 $(u^2, u_x) = 0$. 所以可得

$$\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|u\|_0^2 + \nu\|u_x\|_0^2 = 0, \tag{11.36}$$

再对时间区间$[0, t]$上积分,利用初值条件得

$$\|u\|_0^2 + 2\nu\int_0^t \|u_x\|_0^2 \mathrm{d}\tau = \|\varphi\|_0^2. \tag{11.37}$$

根据一维非负函数的定积分性质,可积必有界,从而存在常数 C_0 使得

$$|u_x|_0 \leqslant C_0.$$

又由 Sobolev 嵌入定理[8,9],可知存在 C_1 使得

$$\|u|_0 \leqslant C_0\|u_x\|_0 \leqslant C_0 C_1,$$

取 $M = C_0 C_1$,并对其在时间域取上界,得证(11.34).

显然,我们只须证明(11.35)也是惟一解. 为此,假定$(\tilde{u}, \tilde{p})$为另一个解,则由(11.34)也有

$$|||\tilde{u}|||_{0,\infty} = \sup_{0 \leqslant t \leqslant t_1} \|\tilde{u}\|_{0,\infty} \leqslant M_0$$

根据(11.32),我们有

$$((u - \tilde{u})_t, v) - (p - \tilde{p}, v_x) = 0, \qquad \forall v \in M,$$

$$(p - \tilde{p}, \tau) + \nu(\tau, (u - \tilde{u})_x) - a(u^2 - \tilde{u}^2, \tau)/2 = 0, \forall \tau \in X,$$

取 $\tau = p - \tilde{p}, v = u - \tilde{u}$,联立上述两式并且利用 Hölder 和 Cauchy 不等式,有

$$\frac{\nu}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|u - \tilde{u}\|_0^2 + \|p - \tilde{p}\|_0^2 = a((u + \tilde{u})(u - \tilde{u}), p - \tilde{p})/2$$

$$\leqslant aM_0\|u - \tilde{u}\|_0\|p - \tilde{p}\|_0 \leqslant \frac{(aM_0)^2}{2}\|u - \tilde{u}\|_0^2 + \frac{1}{2}\|P - \tilde{P}\|_0^2,$$

即得

$$\nu \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\| u - \tilde{u} \|_0^2 + \| p - \tilde{p} \|_0^2 \leqslant (aM_0)^2 \| u - \tilde{u} \|_0^2. \qquad (11.38)$$

对$[0,t]$上积分,再注意初值条件$(u-\tilde{u})(x,0)=0$,我们得到

$$\| u - \tilde{u} \|_0^2 \leqslant \nu^{-1}(aM_0)^2 \int_0^t \| u - \tilde{u} \|_0^2 \mathrm{d}\tau, \quad \forall t \in [0,t_1]. \quad (11.39)$$

根据 gronwall 引理的推论,必然有$\| u - \tilde{u} \|_0 = 0$,即 $u=\tilde{u}$. 再由(11.38)也有$\| p - \tilde{p} \|_0 = 0$,也得 $p=\tilde{p}$. 定理证毕.

罗振东和刘儒勋(参见论文[154])比较深入地讨论了 Burgers 方程的半离散和全离散混合元方法的存在惟一性和误差估计. 并且他们采用混合元方法对于规则长波方程(regulation long wave equation)进行了比较全面的分析和研究(参见论文[153]).

练习题

1. 试对以下的四阶微分方程边值问题

$$\frac{\mathrm{d}^4 u}{\mathrm{d}x^4} = f, x \in (0,1),$$

$$u(0) = u'(0) = u(1) = u'(0) = 0,$$

建立混合元联立变分问题,并且实际地设计离散方案,具体求出问题的近似解.

2. 根据定理 11.1,证明混合变分问题(11.7)的存在惟一.

第十二章　运动有限元方法

在这一章里，我们将向读者介绍另一种非标准有限元方法即所谓的运动有限元方法(moving FEM). 所谓“运动”,是指单元的节点是时间依赖的,自适应地随时间而动的.

众所周知,现实中需要进行数值模拟研究的非定常问题,都存在大变形、大梯度和各类间断. 而这些奇性的波形,它们的空间位置也在随时间不断的改变. 这样以来,对采用固定节点的有限元方法来说,要得到保真的、高分辨率的数值解波形,是相当困难的. 因为，或者是要将单元剖分的非常细小,或者需要不断地进行单元的重新剖分,以适应奇性波形位置的不断变化. 后来所谓的变网格有限元方法(reforming-Grid FEM)[155]、运动网格有限元方法(moving grid FEM)等有限元方法,就是为了解决上述困难而创立的. 而且变网格方法现在有不断的创新和发展,在许多实际问题上得到了有效的应用. 前面向读者介绍的非结构网格方法,本质上也是需要进行网格重分和重构. 也可以说这种网格方法仍然是 Euler 网格加重分、重构过程而已.

这种随时间的变形单元,或者重分单元的方法取得一定的成效,有其独特的长处和理论意义. 可是由于中间过程的单元重新剖分、数据处理等,极大地增加了计算的耗费. 更主要的是,这些方法仍然难以达到及时和自适应的效果.

如何自适应地、及时而合理地自动实现单元尺度的调节,以适应奇性问题的数值模拟需要,这就是后来发展的运动有限元方法—moving FEM. 1981 年 Miller[160,161], Gelinas 等人[79]分别提出运动有限元方法,这是最早比较系统的讨论和应用 MFEM 的奠基性论文. 从实质上讲,这种网格方法是 Lagrangian 型的.

特别是 Miller 等人的论文列举了大量的非线性发展方程问题,例如大 Reynolds 数的 Burgers 方程的初边值问题

$$
\begin{aligned}
& u_t + uu_x = \frac{1}{\mathrm{Re}} u_{xx}, \quad 0 < x < 1, \quad t > 0, \\
& u(x,0) = \sin(2\pi x) + 0.5\sin(\pi x), \\
& u(0,t) = u(1,t) = 0.
\end{aligned}
\tag{12.1}
$$

当 Reynolds 数 $\mathrm{Re} = 10^4$ 的时候,上述问题的解随时间发生着剧烈的变化. 初始是一个光滑的变形正弦波,当计算到 $t = 0.2$ 附近时就基本上出现激波形状. 而在计算到 $t = 1.5$ 附近时,将发生戏剧性的突然改变,原来存在负值的函数改变为完全正值,并且在右边界形成边界层. 想得到这种精细的数值解

的变化,一般的有限元方法、有限差分方法,即使高分辨率方法也是很难以实现的. 采用运动有限元方法,上述的许多作者都给出了非常漂亮的、精细的数值解图形.

由于随着时间的进程,节点或者单元也将相对地密集于变化剧烈的局部区域,所以能够比较有效地、细致地刻画某些剧变的现象. 提出者们利用这种方法出色地计算了固定节点有限元方法难以实现的发展方程问题. 例如,强非线性波问题,Stefan 问题,等等. 而且得到的结果和图象是非常漂亮的.

我们不能在这里详细地、全面地讨论运动有限元方法的方案、步骤和理论分析,只能是作一个简单的介绍,即对比一般的有限元方法,进行运动有限元方法的讨论. 单元的剖分和插值逼近,型函数的特点;特别是,节点是如何随解函数的奇性和梯度的变化而自适应地相对集中;以及可能产生的问题和困难. 有兴趣的读者,可以查阅有关的文献.

12.1 从一般有限元方法到运动有限元方法

几乎当前看到的大多数关于运动有限元方法的论著,都是采用全域上的节点配置和基函数构造,以及总体上的有限元插值逼近函数的展开形式. 这样以来,单元上的插值节点的配置和插值逼近函数的构造就受到一定的限制. 而且,有限元方法的单元分析方法也就难以发挥应有的效应.

以一般发展方程

$$u_t = Lu, \quad X \in \Omega \subset R, t > 0 \tag{12.2}$$

为例进行讨论. 其中 $L = L\left(\frac{\partial}{\partial x}\right)$为拟线性或非线性偏微分算子.

早期的运动有限元方法进行 Ω 域上的统一的节点配置. 例如,给定初始时刻的节点配置

$$\begin{gathered} X = (X_1, X_2, \cdots, X_n); \quad X_i = X_i(t); \\ X_i < X_j, \text{当 } i < j. \end{gathered} \tag{12.3}$$

假定在上述节点上的(初始)函数值记为

$$a_1, a_2, \cdots, a_n; a_i = a_i(t), \tag{12.4}$$

并且,相应于每一个节点的基函数

$$\begin{gathered} \varphi_1, \varphi_2, \cdots, \varphi_n; \ \varphi_i = \varphi_i(X, t; X^i(t)), \\ X^i = (X_{i-l}, \cdots, X_i, \cdots, X_{i+l}), \end{gathered} \tag{12.5}$$

$\varphi_i \in H(i = 1, \cdots, n)$. 其中 H 是某个基函数空间. 于是,我们有全域上的解函数的插值逼近

$$U(x,t) = \sum_{j=1}^{n} \varphi_j(X,t;X^i(t))a_j(t). \tag{12.6}$$

这样一来，运动有限元方法的求解变量，并不像一般有限元方法那样仅仅是节点上的未知函数值 $a_j(j=1,\cdots,n)$，而且还有不断运动中的节点位置 X_j $(j=1,\cdots,n)$. 为了确定未知数值，在通常的一般有限元方法中，即令有限元解函数代入偏微分方程后的余量，与基函数空间正交

$$U_t - L(U) \perp H \text{ 或 } \varphi_j(j=1,\cdots,n). \tag{12.7}$$

但是现在不同，因为我们的未知函数的时间偏导数为

$$\begin{aligned}
\frac{\partial U}{\partial t} &= \sum_{j=1}^{n}\left[\varphi_j \frac{\mathrm{d}a_j}{\mathrm{d}t} + \left(\sum_{i=1}^{n} \frac{\partial \varphi_j}{\partial X_i}\frac{\partial X_i}{\partial t}\right)a_j\right] \\
&= \sum_{j=1}^{n}\varphi_j \frac{\mathrm{d}a_j}{\mathrm{d}t} + \sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial \varphi_j}{\partial X_i}a_j\right)\frac{\partial X_i}{\partial t} \\
&= \sum_{j=1}^{n}\varphi_j \frac{\mathrm{d}a_j}{\mathrm{d}t} + \sum_{i=1}^{n}\left(\sum_{j=1}^{n}\frac{\partial \varphi_j}{\partial X_i}\frac{\partial U}{\partial \varphi_j}\right)\frac{\partial X_i}{\partial t} \\
&= \sum_{j=1}^{n}\varphi_j \frac{\mathrm{d}a_j}{\mathrm{d}t} + \sum_{i=1}^{n}\phi_i\frac{\partial X_i}{\partial t} \\
&= \sum_{j=1}^{n}\varphi_j \frac{\mathrm{d}a_j}{\mathrm{d}t} + \sum_{j=1}^{n}\phi_j\frac{\partial X_j}{\partial t}.
\end{aligned} \tag{12.8}$$

于是，不同于一般有限元方法，我们得到了运动有限元方法中的两组基函数的表达式

$$\left.\begin{aligned}
\varphi_j &= \varphi_j(X(t)) = \frac{\partial U}{\partial a_j}, \\
\phi_j &= \phi_j(X(t)) = \frac{\partial U}{\partial X_j},
\end{aligned}\right\} \quad j = 1,\cdots,n. \tag{12.9}$$

从而，对于运动有限元方法来说，将是由上述两组基函数构成的一个解空间

$$H^* = \mathrm{span}\{\varphi_1,\cdots,\varphi_n;\phi_1,\cdots,\phi_n\}. \tag{12.10}$$

因而，这就要求余量 $R(U)$与上述的解空间 H^*正交

$$U_t - L(U) \perp H^*. \tag{12.11}$$

空间 H^*对于非线性发展方程而言，一般是 Sobolev 空间.

作为一个简例，对于简单的低阶方程，也可以用分段线性的插值逼近函数空间. 不同于一般有限元方法，它的节点位置和幅度是时间依赖的. 特别是第二组基还是间断的线性函数. 对于节点 $X_j(t)(j=1,\cdots,n)$，在区间$[X_{j-1},X_{j+1}]$上对应的两组线性基(φ_j,ϕ_j)中，第一组基为

$$\varphi_j(x) = \begin{cases}(x - X_{j-1})/\Delta X_j, & \text{当 } X_{j-1} \leqslant x < X_j, \\ 1 - (x - X_j)/\Delta X_{j+1}, & \text{当 } X_j \leqslant x < X_{j+1}, \\ 0, & \text{其他}\end{cases} \tag{12.12}$$

其中，$\Delta X_j = X_j - X_{j-1}$为通常的两节点线性单元的长度. 为了求出第二基，我们首先写出上述区间$[X_{j-1}, X_{j+1}]$上的插值逼近函数. 例如

$$U(x) = a_{j-1}\varphi_{j-1} + a_j\varphi_j + a_{j+1}\varphi_{j+1}$$

$$= \begin{cases} a_{j-1} + \dfrac{a_j - a_{j-1}}{X_j - X_{j-1}}(x - X_{j-1}) = a_{j-1} + m_j(x - X_{j-1}), & X_{j-1} \leqslant x < X_j, \\ a_j + \dfrac{a_{j+1} - a_j}{X_{j+1} - X_j}(x - X_j) = a_j + m_{j+1}(x - X_j), X_j \leqslant x < X_{j+1}, \end{cases} \tag{12.13}$$

其中 m_j, m_{j+1}正是插值逼近函数的左、右斜率

$$m_j = \frac{a_j - a_{j-1}}{X_j - X_{j-1}} = \frac{\Delta a_j}{\Delta X_j}. \tag{12.14}$$

根据第二组基的定义式 (18.9)，我们不难得到

$$\phi_j(x) = \begin{cases} -m_j\varphi_j, & \text{当} \quad X_{j-1} \leqslant x < X_j, \\ -m_{j+1}\varphi_{j+1}, & \text{当} \quad X_j \leqslant x < X_{j+1}, \\ 0, & \text{其他} \end{cases} \tag{12.15}$$

图 12.1 表示了在区间$[X_{j-1}, X_{j+1}]$上的插值逼近函数、第一组基函数和第二组基函数的图像.

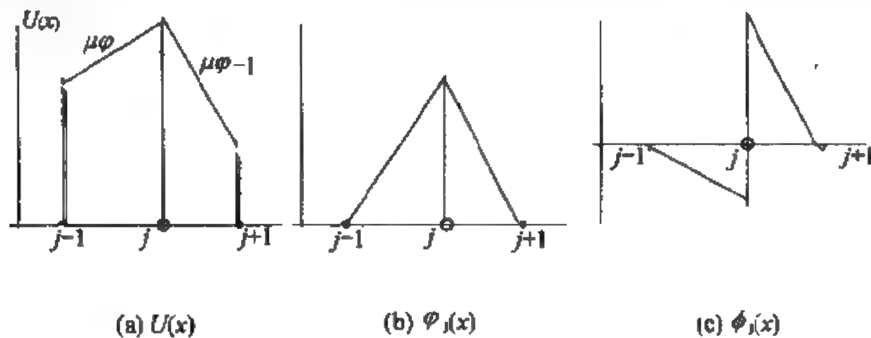


图 12.1 运动有限元方法的两节点线性单元插值函数、两组基函数

运动有限元方法的提出者们采用的是最小二乘型的弱解变分形式，而不是 Galerkin 型的权余法弱解变分形式(事实上两者的结果相同)

$$\begin{aligned}(R,R) &= (\dot U, \dot U) - 2(\dot U, L(U)) + (L(U), L(U)) \\ &= \sum_{j,k}\{(\varphi_j,\varphi_k)\dot a_j \dot a_k + 2(\varphi_j,\phi_k)\dot a_j \dot X_k + (\phi_j,\phi_k)\dot X_j \dot X_k\} \\ &\quad - 2\sum_{j,k}\{(\varphi_j, L(U))\dot a_j + (\phi_j, L(U))\dot X_j\} + (L(U), L(U)).\end{aligned} \tag{12.16}$$

根据正交性，我们有

$$
\begin{aligned}
&\frac{\partial}{\partial a_i}(R,R)=0,\\
&\frac{\partial}{\partial X_i}(R,R)=0,\ i=1,\cdots,n.
\end{aligned}
\tag{12.17}
$$

从而,得到节点位置变化率和节点函数值变化率所满足的一组常微分方程

$$
\begin{aligned}
&\sum_j(\varphi_i,\varphi_j)\dot{a}_j+\sum_j(\varphi_i,\phi_j)\dot{X}_j-(\varphi_i,L(U))=0,\\
&\sum_j(\phi_i,\varphi_j)\dot{a}_j+\sum_j(\phi_i,\phi_j)\dot{X}_j-(\phi_i,L(U))=0.
\end{aligned}
\tag{12.18}
$$

由于每一个基函数 φ_j,或者 ϕ_j,仅仅在它所在的节点两侧的两个单元内有支,所以它对于常微分方程组 (12.18) 的质量矩阵 $M(a,X)$的贡献,也仅与序号 $j-1,j,j+1$ 的位置有关. 因而,如果记

$$
W=(a_1,X_1,\cdots,a_i,X_i,\cdots,a_n,X_n)^{\mathrm{T}},
\tag{12.19}
$$

常微分方程组 (12.18) 即为

$$
\begin{aligned}
&M(a,X)\dot{W}=g(a,X)\ \text{或}\\
&M(W)\dot{W}=g(W)
\end{aligned}
\tag{12.20a}
$$

其中

$$
M(W)=\begin{pmatrix}
A_1 & B_1 & 0 & \cdots & 0\\
C_2 & A_2 & B_2 & \cdots & 0\\
0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\
0 & 0 & C_{n-1} & A_{n-1} & B_{n-1}\\
0 & 0 & 0 & C_n & A_n
\end{pmatrix},\quad
g(W)=\begin{pmatrix}
g_1\\ g_2\\ \vdots\\ g_{n-1}\\ g_n
\end{pmatrix}
\tag{12.20b}
$$

及

$$
\begin{aligned}
&A_i=\begin{pmatrix}(\varphi_i,\varphi_i) & (\varphi_i,\phi_i)\\ (\phi_i,\varphi_i) & (\phi_i,\phi_i)\end{pmatrix},\quad
B_i=\begin{pmatrix}(\varphi_i,\varphi_{i+1}) & (\varphi_i,\phi_{i+1})\\ (\phi_i,\varphi_{i+1}) & (\phi_i,\phi_{i+1})\end{pmatrix},\\
&C_i=\begin{pmatrix}(\varphi_i,\varphi_{i-1}) & (\varphi_i,\phi_{i-1})\\ (\phi_i,\varphi_{i-1}) & (\phi_i,\phi_{i-1})\end{pmatrix},\quad
g_i=\begin{pmatrix}\varphi_i,L(U)\\ \phi_i,L(U)\end{pmatrix}.
\end{aligned}
\tag{12.20c}
$$

显然,这种全域上的有限元离散过程不是很方便的,因为它过于烦琐、累赘,特别是难以进行单元分析. 尤其是不能像一般有限元方法中那样,进行单元的高阶插值逼近. 譬如,求解如 KdV 或者 RLW 方程那种必须利用高阶插值逼近的问题. 早在 1986 年论文[141]就提出了运动有限元方法的单元分析思想,并且对于三节点的二次单元的构造形式,以及生成非线性 Burgers 方程的有限元解,得到和运动有限元方法创始者完全一致的离散结果. 下面我们采用单元分析和总体复合的方法,进行运动有限元方法的讨论.

12.2 运动有限元方法单元分析的一般公式

1. 单元上的运动有限元分析

考虑拟非线性发展方程(12.20a)的一般问题

$$u_t = Lu,\quad X = (x,y,\cdots,z) \in \Omega \subset R^n, t > 0, \tag{12.21a}$$

其中微分算子

$$L = L\left(\frac{\partial}{\partial x},\frac{\partial}{\partial y},\cdots,\frac{\partial}{\partial z}\right)$$

对求解区域作单元剖分

$$\Omega = \sum_{e=1}^{N}\Omega_e, \tag{12.21b}$$

在单元 Ω_e 内,配置了 N_e 个节点 $X_j^e(j=1,2,\cdots,N_e)$. 记节点位置向量和在节点上的未知函数瞬时值向量

$$X^{(e)} = (X_1^e, X_2^e,\cdots,X_{N_e}^e) = (X_1,\cdots,X_{N_e})^{(e)},\quad A^{(e)} = (a_1^e,a_2^e,\cdots,a_{N_e}^e) = (a_1,\cdots,a_{N_e})^{(e)}, \tag{12.22a}$$

其中

$$X_j^e = X_j^e(t) = (x_j(t),y_j(t),\cdots,z_j(t))^{(e)},\quad a_j^e = a_j^e(t) = u(X_j^e(t),t) \qquad j=1,2,\cdots,N_e. \tag{12.22b}$$

根据通常一般有限元方法的单元分析方法,在单元 Ω_e 上构造一组线性无关的、完备的基函数(这里仅仅讨论 Lagrangian 基)

$$\Phi^{(e)} = (\varphi_1,\varphi_2,\cdots,\varphi_{N_e})^{(e)},\quad \varphi_j^e = \varphi_j^e(X,X^{(e)}(t)). \tag{12.23}$$

今后约定,右上标"e"所指示的函数、量和表达式只在单元 Ω_e 内有定义.

在单元 Ω_e 上,仿照一般有限元方法那样,未知函数 $u(X,t)$的插值逼近可以表作

$$U^e(X,t) = \sum_{j=1}^{N_e}\varphi_j^e(X,X^{(e)}(t))a_j^e = \Phi^{(e)}A^{(e)},\quad \dot U^e(X,t) = \sum_{j=1}^{N_e}\phi_j^{(e)}\dot a_j^e + \phi_j^e\dot X_j^e = \Phi^{(e)}\dot A^{(e)} + \psi^{(e)}\dot X^{(e)}. \tag{12.24}$$

在单元 Ω_e 上,利用权余方法积分

$$\int_{\Omega_e}(\dot U^e(X,t) - L(U^e))v\,\mathrm{d}X$$

$$=\int_{\Omega_e}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\Phi^{(e)}A^{(e)}) - L(\Phi^{(e)}A^{(e)})\right)v\mathrm{d}X$$

$$=\int_{\Omega_e}\left(\sum_{j=1}^{N_e}\left(\varphi_j^e\frac{\mathrm{d}a_j^e}{\mathrm{d}t} + \phi_j^e\frac{\mathrm{d}X_j^e}{\mathrm{d}t}\right) - L(\Phi^{(e)}A^{(e)})\right)v\mathrm{d}X = 0, \tag{12.25a}$$

$$\varphi_j^e \in P_{N_e} \quad \phi_j^e = \phi_j^e(\Phi^{(e)}), j = 1,\cdots,N_e.$$

为了简洁起见，我们采用向量和内积的记法，重写上式

$$(\Phi\dot{A} + \psi\dot{X} - L\Phi A, v)^{(e)}$$
$$= ((\Phi\dot{A} + \psi\dot{X}), v)^{(e)} - (L\Phi A, v)^{(e)} = 0, \tag{12.25b}$$
$$\psi^{(e)} = \frac{\partial U^{(e)}}{\partial X^{(e)}} = \frac{\partial(\Phi^{(e)})}{\partial(X^{(e)})}\cdot A^{(e)}, \ \forall v \in H_e^*(\Omega_e).$$

作为权余方法的 Galerkin 方法，权函数或者实验函数 v 即取 $\varphi_j^e, \phi_j^e, j = 1,\cdots,N_e$. 用它们分别代入，可得单元上的运动有限元常微分方程组

$$(\Phi,\Phi)^{(e)}\dot{A}^{(e)} + (\psi,\Phi)^{(e)}\dot{X}^{(e)} = (L\Phi A,\Phi)^{(e)},$$
$$(\Phi,\psi)^{(e)}\dot{A}^{(e)} + (\psi,\psi)^{(e)}\dot{X}^{(e)} = (L\Phi A,\psi)^{(e)}. \tag{12.25c}$$

由于这里共有 $2\times N_e$ 个未知量 $A^{(e)}, X^{(e)}$，所以可以将上式合并为

$$M^e\dot{W}^e = g^e, W^e = (A^{(e)}, X^{(e)})^{\mathrm{T}},$$
$$M^e = \begin{pmatrix}(\Phi,\Phi)^{(e)} & (\psi,\Phi)^{(e)}\\ (\Phi,\psi)^{(e)} & (\psi,\psi)^{(e)}\end{pmatrix}, g^e = \begin{pmatrix}(L\Phi A,\Phi)^{(e)}\\ (L\Phi A,\psi)^{(e)}\end{pmatrix}. \tag{12.25d}$$

2. 全解域上的运动有限元分析

假定整个求解区域上的节点数仍然如前面第一小节，有限元离散后的常微分方程组形式也类似，即

$$M\dot{W} = g, \ W = (a_1, X_1, \cdots, a_n, X_n)^{\mathrm{T}}. \tag{12.26}$$

为了通过单元的常微分方程组(12.25d)的叠加、最终得到它，我们采用一种选择矩阵的数学形式，即完全是形式上的引入一个选择矩阵 C^e($N_e\times 2n$ 阶矩阵)，使得

$$W^e = C^eW, \tag{12.27}$$

从而(12.25d)可以表示为

$$M_e\dot{W} = g_e, \quad M_e = (C^e)^{\mathrm{T}}M^eC^e, \quad g_e = (C^e)^{\mathrm{T}}g^e, \tag{12.28}$$

其中 M_e, g_e 是单元 Ω_e 对于总体运动有限元的质量矩阵、右函数的贡献. 于是我们能容易地叠加，得到

$$M = \sum_e M_e = \sum_e (C^e)^{\mathrm{T}}M^eC^e,$$

$$g = \sum_e g_e = \sum_e (C^e)^{\mathrm{T}} g^e. \tag{12.29}$$

12.3 运动有限元方法单元分析的简单实例[141]

现在我们仅仅对于一维的标量方程问题进行运动有限元方法，特别是针对两节点线性插值单元，和三节点二次插值单元，进行简单的讨论．实质上就是基函数的构造问题．

1. 两节点线性单元的基函数，以及离散常微分方程组

一维的单元可以一般地表示为

$$\Omega_i = [x_{i-1}, x_i],\ h_i = x_i - x_{i-1}. \tag{12.30}$$

记

$$\begin{aligned} X^{(i)} &= (x_{i-1}, x_i) = (x_1, x_2)^{(i)}, \quad x_j^{(i)} = x_j^{(i)}(t),\ j = 1,2, \\ A^{(i)} &= (a_{i-1}, a_i) = (a_1, a_2)^{(i)}, \quad a_j^{(i)} = a_j^{(i)}(t),\ j = 1,2. \end{aligned} \tag{12.31}$$

根据固定节点的一般有限元方法的单元分析，首先有基函数

$$\Phi^{(i)} = (\varphi_1, \varphi_2)^{(i)} = (1 - \xi, \xi)^{(i)}, \quad \xi = \frac{x - x_1^{(i)}}{h_i} \in [0,1]. \tag{12.32}$$

在单元 Ω_i 上的线性插值逼近函数，及其时间导数分别为

$$\begin{aligned} U^{(i)}(x,t) &= \Phi^{(i)} A^{(i)} = (1 - \xi, \xi)^{(i)} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}^{(i)}, \\ \dot{U}^{(i)}(x,t) &= \Phi^{(i)} \dot{A}^{(i)} + \psi^{(i)} \dot{X}^{(i)} = (1 - \xi, \xi)^{(i)} \begin{bmatrix} \dot{a}_1 \\ \dot{a}_2 \end{bmatrix}^{(i)} + (-\dot{\xi}, \dot{\xi})^{(i)} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix}^{(i)} \\ &= \Phi^{(i)} \dot{A}^{(i)} + (A^{(i)})^{\mathrm{T}} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix} \frac{1}{h_i} (\xi_{x_1}, \xi_{x_2}) \begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{bmatrix}^{(i)} \\ &= \Phi^{(i)} \dot{A}^{(i)} - \frac{(a_2 - a_1)^{(i)}}{h_i} (1 - \xi, \xi)^{(i)} \begin{bmatrix} \dot{x}_1 \\ \dot{x}_2 \end{bmatrix}^{(i)}. \end{aligned} \tag{12.33}$$

从而，利用第二组基函数的定义（12.9）或者(12.25b)，我们不难证明一般地有

$$\psi^{(i)} = -m^{(i)} \Phi^{(i)}, \quad m^{(i)} = \frac{(a_2 - a_1)^{(i)}}{h_i}, \quad \forall i. \tag{12.34}$$

利用(12.32～34)，代入(12.25c)可得

$$(\Phi,\Phi)^{(i)} = \begin{pmatrix}(\varphi_1,\varphi_1) & (\varphi_1,\varphi_2)\\ (\varphi_2,\varphi_1) & (\varphi_2,\varphi_2)\end{pmatrix},$$

$$(\Phi,\psi)^{(i)} = \begin{pmatrix}(\varphi_1,\phi_1) & (\varphi_1,\phi_2)\\ (\varphi_2,\phi_1) & (\varphi_2,\phi_2)\end{pmatrix}\cdots \tag{12.35a}$$

其中,譬如

$$(\Phi,\Phi)^{(i)} = \int_{\Omega_i}(\Phi^{(i)})^{\mathrm{T}}\Phi^{(i)}\mathrm{d}x$$

$$= \int_0^1\begin{pmatrix}1-\xi\\ \xi\end{pmatrix}(1-\xi \quad \xi)h_i\mathrm{d}\xi = h_i\begin{pmatrix}\frac{1}{3} & \frac{1}{6}\\ \frac{1}{6} & \frac{1}{3}\end{pmatrix},$$

$$(\Phi,\psi)^{(i)} = \int_{\Omega_i}(\Phi^{(i)})^{\mathrm{T}}\psi^{(i)}\mathrm{d}x$$

$$= -\int_0^1\begin{pmatrix}1-\xi\\ \xi\end{pmatrix}m_i(1-\xi \quad \xi)h_i\mathrm{d}\xi = -m_ih_i\begin{pmatrix}\frac{1}{3} & \frac{1}{6}\\ \frac{1}{6} & \frac{1}{3}\end{pmatrix},$$

$$(\psi,\psi)^{(i)} = \int_{\Omega_i}(\psi^{(i)})^{\mathrm{T}}\psi^{(i)}\mathrm{d}x$$

$$= m_i^2\int_0^1\begin{pmatrix}1-\xi\\ \xi\end{pmatrix}(1-\xi \quad \xi)h_i\mathrm{d}\xi = m_i^2h_i\begin{pmatrix}\frac{1}{3} & \frac{1}{6}\\ \frac{1}{6} & \frac{1}{3}\end{pmatrix}, \tag{12.35b}$$

应当指明的是,如果求解域剖分为 N 个单元,并且左右两个端点边条件如果是第三、四类条件,那么未知节点向量 W 是 $2N+2$ 维,于是我们所说的选择矩阵 C^e 显然是

$$\begin{matrix} & & 2i-1 & 2i & 2i+1 & 2i+2 & \\ & & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow & \end{matrix}$$

$$C^e = \begin{pmatrix}0\cdots 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0\cdots 0\\ 0\cdots 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0\cdots 0\\ 0\cdots 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0\cdots 0\\ 0\cdots 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0\cdots 0\end{pmatrix}.$$

这就是说,单元 Ω_i 对于整个求解域运动有限元离散的常微分方程组的贡献是

$$M=\begin{array}{c} \begin{matrix} 2i-1 & 2i & 2i+1 & 2i+2 \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \downarrow \end{matrix} \\ \begin{pmatrix} & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \\ \cdots & (\varphi_1,\varphi_1)^{(i)} & (\varphi_1,\phi_1)^{(i)} & (\varphi_1,\varphi_2)^{(i)} & (\varphi_2,\phi_1)^{(i)} & \cdots \\ \cdots & (\phi_1,\varphi_1)^{(i)} & (\phi_1,\phi_1)^{(i)} & (\varphi_2,\phi_1)^{(i)} & (\phi_1,\phi_2)^{(i)} & \cdots \\ \cdots & (\varphi_2,\varphi_1)^{(i)} & (\phi_2,\varphi_1)^{(i)} & (\varphi_2,\varphi_2)^{(i)} & (\varphi_2,\phi_2)^{(i)} & \cdots \\ \cdots & (\phi_2,\varphi_1)^{(i)} & (\phi_2,\phi_1)^{(i)} & (\phi_2,\varphi_2)^{(i)} & (\phi_2,\phi_2)^{(i)} & \cdots \\ & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \end{pmatrix}_{(2N+2)\times(2N+2)} \end{array},$$

$$g=\begin{pmatrix} \vdots \\ (\varphi_1,L\Phi A)^{(i)} \\ (\phi_1,L\Phi A)^{(i)} \\ (\varphi_2,L\Phi A)^{(i)} \\ (\phi_2,L\Phi A)^{(i)} \\ \vdots \end{pmatrix}\begin{matrix} \\ \leftarrow 2i-1 \\ \leftarrow 2i \\ \leftarrow 2i+1 \\ \leftarrow 2i+2 \\ \\ \end{matrix}.$$

可以看到在实际操作时,选择矩阵仅仅是一种数学的工具或者形式,它让我们从数学上对问题的讨论更加明晰.

2. 三节点二次单元的基函数和插值逼近

如果采用三节点单元

$$\Omega_i=[x_{i-1},x_i]=[x_1,x_3]^{(i)},$$
$$\xi=\frac{x-x_1^{(i)}}{h_i},\quad h_i=x_3^{(i)}-x_1^{(i)}, \tag{12.36a}$$

从而需要引入一个中间节点 $x_2^{(i)}$. 这个中间节点是不应该等于 Ω_i 的左右两个端点的,即可以认为

$$x_2^{(i)}-x_1^{(i)}=\sigma h_i,\quad 0<\sigma<1, \tag{12.36b}$$

于是我们有

$$X^{(i)}=(x_1,x_2,x_3)^{(i)},$$
$$A^{(i)}=(a_1,a_2,a_3)^{(i)}. \tag{12.37}$$

不难给出该单元上的二次插值基函数

$$\Phi^{(i)}=(\varphi_1,\varphi_2,\varphi_3)^{(i)}=$$
$$\left(\frac{1}{\sigma}(\xi-1)(\xi-\sigma),\quad \frac{1}{\sigma(\sigma-1)}(\xi-1)\xi,\quad \frac{1}{(1-\sigma)}\xi(\xi-1)\right). \tag{12.38}$$

通过比较烦琐的推导,我们可以得到第二组基函数

$$
\begin{aligned}
\psi^{(i)} &= (b_1\varphi_1, b_2\varphi_2, b_3\varphi_3)^{(i)}, \\
b_1 &= \frac{1}{h_i}\left(\frac{1+\sigma}{\sigma}a_1 - \frac{1}{\sigma(1-\sigma)}a_2 + \frac{\sigma}{1-\sigma}a_3\right), \\
b_2 &= \frac{1}{h_i}\left(\frac{1-\sigma}{\sigma}a_1 - \frac{1-2\sigma}{\sigma(1-\sigma)}a_2 + \frac{\sigma-2}{1-\sigma}a_3\right), \\
b_3 &= \frac{1}{h_i}\left(-\frac{1-\sigma}{\sigma}a_1 + \frac{1}{\sigma(1-\sigma)}a_2 - \frac{2-\sigma}{1-\sigma}a_3\right),
\end{aligned} \tag{12.39}
$$

而且

$$
\begin{aligned}
(\varphi_1, \varphi_1)^{(i)} &= \frac{1}{\sigma^2}\left(\frac{\sigma^2}{3} - \frac{\sigma}{6} + \frac{1}{30}\right)h_i, \\
(\varphi_1, \varphi_2)^{(i)} &= \frac{1}{(1-\sigma)\sigma^2}\left(\frac{\sigma}{12} - \frac{1}{30}\right)h_i, \\
(\varphi_2, \varphi_2) &= \frac{1}{\sigma^2(1-\sigma)^2}\cdot\frac{h_i}{30} \\
(\varphi_1, \varphi_3)^{(i)} &= \frac{1}{\sigma(1-\sigma)}\left(-\frac{\sigma^2}{6} + \frac{\sigma}{6} - \frac{1}{20}\right)h_i, \\
(\varphi_2, \varphi_3)^{(i)} &= \frac{1}{\sigma(1-\sigma)^2}\left(-\frac{\sigma}{12} + \frac{1}{20}\right)h_i, \\
(\varphi_3, \varphi_3)^{(i)} &= \frac{1}{(1-\sigma)^2}\left(\frac{\sigma^2}{3} - \frac{\sigma}{2} + \frac{1}{5}\right)h_i.
\end{aligned} \tag{12.40}
$$

相应地可以求出第二组基函数的内积,以及第一组和第二组基函数之间的内积. 其他的讨论完全类似地进行. 不再赘述.

可能读者以为如果我们在单元中,均取中点

$$x_2^{(i)} = (x_1^{(i)} + x_3^{(i)})/2,$$

即 $\sigma=0.5$,上述的公式将会大为简化. 其实不然,因为运动有限元方法的节点是在随时间运动的,所以即使开始是规则的,而后随时可能改变.

12.4 运动有限元方法在非线性波问题的应用

作为实际的非线性波问题的例子,我们来考虑 Burgers 方程和 KdV 方程

$$\dot{u} = -u\frac{\partial u}{\partial x} + \nu\frac{\partial^2 u}{\partial x^2}, \tag{12.41}$$

$$\dot{u} = -u\frac{\partial u}{\partial x} - \mu\frac{\partial^3 u}{\partial x^3}, \tag{12.42}$$

其中 $\nu=\frac{1}{\mathrm{Re}}$, $\mathrm{Re}\gg 1$ 称为 Reynolds 数. $0<\mu\ll 1$ 为常数,例如 $\mu=4.84\times$

10^{-4}. 在某些即使光滑的初值下,前者产生不定常激波,后者可能产生孤立波解. 采用一般的有限元方法,或者一般有限差分方法求解,必须取微小的空间步长和很多的节点. 即使这样仍然由于激波或者孤立子的位置的不断运动,使数值解始终达不到满意的效果. 利用运动有限元方法,因为节点能够适时地随解的梯度的变化,所以能够采用比较少的节点达到很好的模拟效果.

这里需要注意上述两个方程的空间算子项中,有空间的二阶导数. 如果我们采用两节点的线性单元时,单元上的插值函数求二阶导数将变成零,即在求 $L(\Phi A)^{(i)}$时

$$\nu\frac{\partial^2}{\partial x^2}(\Phi A)^{(i)} \text{ 或者 } \mu\frac{\partial^3}{\partial x^3}(\Phi A)^{(i)}$$

项将会消失. 而且后者即使是三节点单元的二阶插值函数也是一样. Miller 等早就提出了一种方法克服这一困难,就是在求高阶导数项的内积时,采用磨光算子方法. 下面我们将在具体生成离散常微分方程时介绍.

首先讨论 Burgers 方程. 因为时间导数项生成的单元质量矩阵 $M^{(i)}$前面已经作了交代,所以不再讨论. 以两节点线性单元为例,需要计算的是

$$(\varphi_j, L\Phi A)^{(i)} = -(\varphi_j, \Phi A\Phi_x)^{(i)}A^{(i)} + \nu(\varphi_j, \Phi_{xx})^{(i)}A^{(i)},$$

$$(\varphi_j, L\Phi A)^{(i)} = -(\varphi_j, \Phi A\Phi_x)^{(i)}A^{(i)} - \nu((\varphi_j)_x, \Phi_x)^{(i)}A^{(i)} + \nu\varphi_j u_x\Big|_{x_{i-1}}^{x_i}, \tag{12.43a}$$

$$(\phi_j, L\Phi A)^{(i)} = -m_i(\varphi_j, L\Phi A)^{(i)}, \quad j = 1,2.$$

显然右端的第一项并不存在丢失的问题,问题在第二项. 显然

$$\Phi_x = -\frac{1}{h_i}(1, -1). \tag{12.43b}$$

至于二阶项的计算,如果直接采用(12.43a)的第一式计算,就需要利用磨光算子,即定义磨光算子函数

$$(\varphi_1, \Phi_{xx}A)^{(i)} = \lim_{\delta\to 0}\frac{1}{2}\int_{x_1^{(i)}-\frac{\delta}{2}}^{x_1^{(i)}+\frac{\delta}{2}}\varphi_1\left[\frac{(\Phi_x A)(x+\frac{\delta}{2}) - (\Phi_x A)(x-\frac{\delta}{2})}{\delta}\right]dx = m_i,$$

$$(\varphi_2, \Phi_{xx}A)^{(i)} = \lim_{\delta\to 0}\frac{1}{2}\int_{x_2^{(i)}-\frac{\delta}{2}}^{x_2^{(i)}+\frac{\delta}{2}}\varphi_2\left[\frac{(\Phi_x A)(x+\frac{\delta}{2}) - (\Phi_x A)(x-\frac{\delta}{2})}{\delta}\right]dx = -m_i. \tag{12.44}$$

如果采用的是(12.43a)的第二式计算,未知函数又是光滑的,单元间的边界项两两相抵

$$-(\varphi_{1x}, \Phi_x A) = -\int_{x_{i-1}}^{x_i}\left(\frac{-1}{h_i}\right)\left(\frac{-1}{h_i}, \frac{1}{h_i}\right)A\,dx = \frac{a_2 - a_1}{h_i} = m_i,$$

结果是相同的. 但是,前面的讨论并没有假定未知函数是光滑的条件. 利用上述的结果,我们容易得到

$$(\varphi_1, L\Phi A)^{(i)} = m_i\left[\left(\frac{1}{3}a_1 + \frac{1}{6}a_2\right)^{(i)} h_i + \nu\right],$$

$$(\varphi_2, L\Phi A)^{(i)} = m_i\left[\left(\frac{1}{6}a_1 + \frac{1}{3}a_2\right)^{(i)} h_i - \nu\right],$$

$$(\phi_1, L\Phi A)^{(i)} = -m_i(\varphi_1, L\Phi A)^{(i)} = m_i^2\left[\left(\frac{1}{3}a_1 + \frac{1}{6}a_2\right)^{(i)} h_i + \nu\right],$$

$$(\phi_2, L\Phi A)^{(i)} = -m_i(\varphi_2, L\Phi A)^{(i)} = m_i^2\left[\left(\frac{1}{6}a_1 + \frac{1}{3}a_2\right)^{(i)} h_i - \nu\right],$$

(12.45)

有了上述的公式,我们就可以根据 (12.29)(12.29*)进行总体的合成,得到运动有限元方法的常微分方程组 (12.28). 我们这样通过运动元的单元分析,复合形成的方式,所得到的结果,完全相同于 Miller 等人的结果. 但是我们的方法是更灵活、简便和容易进行.

进一步考虑三节点二次插值逼近的情况. 由 (12.36～12.40)得

$$\Phi_x^{(i)} = (\varphi_{1x}, \varphi_{2x}, \varphi_{2x})^{(i)}$$

$$= \frac{1}{h_i}\left(\frac{1}{\sigma}(2\xi - \sigma - 1),\ -\frac{1}{\sigma(1-\sigma)}(2\xi - 1),\ \frac{1}{1-\sigma}(2\xi - 1)\right),$$

$$\Phi_{xx}^{(i)} = (\varphi_{1xx}, \varphi_{2xx}, \varphi_{2xx})^{(i)} = \frac{2}{h_i}\left(\frac{1}{\sigma},\ -\frac{1}{\sigma(1-\sigma)},\ \frac{1}{1-\sigma}\right).$$

(12.46)

利用(12.38～12.39),以及下面的基函数的积分表和对称性,我们也不难求出运动有限元方法的常微分方程组的右端项

$l \backslash k$	1	2	3
1	$\frac{h_i}{\sigma^2}\left(\frac{\sigma^2}{12} - \frac{\sigma}{15} + \frac{1}{60}\right)$	$\frac{h_i}{\sigma^2(1-\sigma)}\left(\frac{\sigma}{30} - \frac{1}{60}\right)$	$\frac{h_i}{\sigma(1-\sigma)}\left(-\frac{\sigma^2}{12} + \frac{\sigma}{10} - \frac{1}{30}\right)$
2		$\frac{h_i}{\sigma^2(1-\sigma)^2}\frac{1}{60}$	$\frac{h_i}{\sigma(1-\sigma)^2}\left(-\frac{\sigma}{20} + \frac{1}{30}\right)$
3			$\frac{h_i}{(1-\sigma)^2}\left(\frac{\sigma^2}{4} - \frac{2\sigma}{5} + \frac{1}{6}\right)$

在上表中,由于对称性我们只列出来上三角形的积分公式.

如果用运动有限元方法求解 KdV 方程,显然采用二节点的线性单元不可能实现. 即使利用三节点的二次单元,也需要对于三阶空间导数的情况进行分部积分,或者利用磨光算子的方法,求右函数 g. 例如

$$(\varphi_j,(\Phi A)_{xxx})^{(i)}=\lim_{\delta\to 0}\frac{1}{2\delta}\left\{\int_{x_1^{(i)}-\frac{\delta}{2}}^{x_1^{(i)}+\frac{\delta}{2}}+\int_{x_3^{(i)}-\frac{\delta}{2}}^{x_3^{(i)}+\frac{\delta}{2}}\right\}$$

$$\varphi_j\left[(\Phi A)_{xx}\left(x+\frac{\delta}{2}\right)-(\Phi A)_{xx}\left(x-\frac{\delta}{2}\right)\right]\mathrm{d}x$$

$$=\lim_{\delta\to 0}\frac{1}{\delta}\left\{\int_{x_1^{(i)}}^{x_1^{(i)}+\frac{\delta}{2}}+\int_{x_3^{(i)}-\frac{\delta}{2}}^{x_3^{(i)}}\right\}\varphi_j\mathrm{d}x(\Phi A)_{xx}^{(i)},$$

这里是因为被积函数的差分中，$(\Phi A)_{xx}^{(i)}$已经是不依赖空间变量 x，可以提到积分号外．我们不难得到

$$(\varphi_1,(\Phi A)_{xxx})^{(i)}=\left(\frac{a_1}{\sigma}-\frac{a_2}{\sigma(1-\sigma)}+\frac{a_3}{1-\sigma}\right),$$

$$(\varphi_2,(\Phi A)_{xxx})^{(i)}=0,$$

$$(\varphi_3,(\Phi A)_{xxx})^{(i)}=\frac{1+\sigma}{1-\sigma}\left(\frac{a_1}{\sigma}-\frac{a_2}{\sigma(1-\sigma)}+\frac{a_3}{1-\sigma}\right).\qquad(12.47)$$

利用上述结果和前一节的公式，我们容易求出对于 KdV 方程的运动有限元方法的常微分方程组．不过要注意每一次计算到 W^{n+1}，我们需要计算每一个单元的中间节点的分割比 σ 和其他的量，譬如 hi，b_1，b_2，b_3 等等．并且当出现 $\sigma\sim 0$或者 $\sigma\sim 1$ 的极端情况时，能够适时地进行处理和调节，以避免运动节点过分的集中．

总之，这种运动有限元方法的单元分析途径，是十分有意义和有效的．1990 年以来的许多研究者也开始采用这种单元分析的方法．特别是这种方式更加有利于运动有限元方法的理论和应用方案的研究．

12.5 运动有限元方法的研究课题和进展

运动有限元方法的主要问题是：

1．节点的自适应调节和控制

由于在运动有限元方法中的所有节点都是运动的，在实际的数值计算，特别是在间断解的数值模拟过程中，常常可能产生节点的过分集中，甚至有收缩和凝聚的趋向．因而不得不进行计算过程的节点重置，这给计算带来很大的困难．为此，方法的提出者采用了引入节点间的黏性系数，或者说节点间的弹性因子．例如他们在 (12.16～12.17) 中插入节点间的黏性项，将二次式变为

$$\begin{aligned}\|(R,R)\| &= \|\dot{U} - LU\|^2 \\ &\to \|\dot{U} - LU\|^2 + \sum_{j=1}^{N} \cdot \varepsilon \|X_j - X_{j-1}\|^2\}.\end{aligned} \tag{12.48}$$

论文[145]利用节点速度的线性化表示,提出了一种可以避免这种问题的简化的运动有限元方法．这种控制节点运动速度的思想是非常有意义的．同时,采用三节点单元,并适当地控制中间节点的长度比 σ,或者采用其他的限制因子,可以达到需要的效果．这也是运动有限元方法的一个很有趣的研究课题．

2．常微分方程组的刚性问题

运动有限元方法节点的自适应运动和它们向解的大梯度附近的集中,特别是因为两组基函数的复杂情况,其中第二组还是间断的．因而生成的质量矩阵 M 常常是坏条件的．右函数又是非线性的,如果写成未知数向量形式 $g = BW$,同样是坏条件的．所以得到的常微分方程组多半是刚性的(Stiff)．从而,一般要求采用比较有效的数值解方法．我们认为采用 Shu 等人提出的显式或者隐式的 Runge-Kutta 方法是有效和高精度的．当然,这也不失为一个有一定难度的研究课题．

3．运动有限元方法的理论分析

显然,运动有限元方法的理论分析比起一般有限元方法来要复杂和困难的多．Baines 等人[11-13,1,239,103]进行了运动有限元方法的误差估计,收敛性等的理论分析,他基本上是针对一维问题进行的．特别是 Baines 的许多论文,采用了 Legende 变换,速度映射,特征方向等的新概念．

4．多维问题的运动有限元方法

不言而喻,运动有限元方法的多维推广是相当困难的．虽然,也已经有如 Baines 等人的理论探讨,但是真正有效地进行实际的数值计算,进行非线性波问题的数值模拟,还是罕见的．这方面的任务相当艰巨．最近 Carlson 和 Miller 的两篇著名论文给出了可喜的进展[26,27]．特别是他们提出了斜量加权的运动有限元方法,而且在实际应用中,尤其是在非线性波问题的二维计算中,得到了非常漂亮的结果．

这里,我们仅仅列出了最具有代表性的参考文献．有兴趣的读者可以进一步查阅这些论文后面的参考文献．

第十三章　间断有限元方法

间断有限元方法(discontinuous FEM)的出现,最早可以追溯到 1973 年 Reed 和 Hill 关于中子输运方程问题的论文[177]. 特别是 80 年代以来,出现了丰富多样的 DGM 方法,如 Bassy-Rebay 方法,Baumann-Oden 方法,Babuska-Zlamal 方法等. 由于众多学者的不断发展,间断有限元方法,近年来发展的间断 Galerkin 有限元方法[68,109,113],特别是 90 年代以来,以 Cockburn 和 Chi-Wang Shu 为代表提出的 Runge-Kutta 间断 Galerkin 方法[49~57],尤其引人注目,在许多方面的应用上显示了前所未有的效能. 在解决含有间断现象的问题中发挥着越来越大的作用,它广泛地应用到了水动力学,气动力学,波传播等问题. 数学上,它在解决无论是椭圆方程(elliptic equations)[175],双曲守恒律组(hyperbolic conservation laws)、Hamilton-Jacobia 方程[104],对流扩散方程(convection-diffusion equations)[57,33],还有 KdV 方程[247],QHD(quantum hydrodynamic)方程、MHD(magneto hydrodymanic)方程、黏弹性流体(viscoelastic flow)方程、Maxwell 方程等问题中都是卓有成效的.

从总体上来讲,间断有限元方法既保持了 FEM 和 FVM 的优点,又克服了其不足. 特别是易于处理复杂边界和边值问题;同时 DGM 具有灵活处理间断的能力,克服了一般 FEM 不适于间断问题的缺点;DGM 方法精度的提高可以通过适当选取基函数,即提高单元插值多项式的次数来实现,这克服了 FVM 中通过扩大节点模板计算剖分单元交界面处的流通量的方法来提高精度的不足;由于近似解的间断性假设,对网格正则性要求不高,不需要考虑像一般有限元方法中连续姓的限制条件就可以对网格进行加密或减疏处理,而且不同的剖分单元可以采用不同形式、不同次数的逼近多项式,有利于自适应网格的形成;尤其是 Runge-Kutta DGM 中,由于单元基函数在单元交界处允许出现间断,可以通过适当地选取基函数,使得质量矩阵是分块对角的,而且每一块的阶数和相应单元的自由度相同,并且在每一步 Runge-Kutta 计算中,为了求解给定单元内部的自由度,只需要相临单元的自由度,从而处理器之间的信息传递量保持最小,有利于并行算法的实现.

13.1　一维守恒律问题

1. 空间离散及弱形式

间断有限元方法是利用完全间断的分片多项式空间作为近似解和试验函

数空间的一种有限元方法.

考虑一维守恒律组

$$u_t + f(u)_x = 0, \quad x \in [0,1], \tag{13.1}$$

首先剖分区间$[0,1]$为单元集合 $I_j = [x_{j-1/2}, x_{j+1/2}], j = 1,2,\cdots,N$ 其中$x_{1/2} = 0, x_{N+1/2} = 1$. 定义离散区间中点为 $x_j = \frac{1}{2}(x_{j-1/2} + x_{j+1/2})$,单元长度为 $\Delta x_j = x_{j+1/2} - x_{j-1/2}$. 实际上,单元长度不一定是一致的,这里为了叙述的简便,采用一致长度 Δx. 设有限元空间为 $U_h = \{v: v \in L^1[0,1]\ v|_{I_j} \in P^k\}$,则 $\dim U_h = (k+1)N$.

如下定义间断有限元方法,用连续函数 v 乘方程的两端,并利用分步积分,得

$$\int_{I_j} v u_t \mathrm{d}x - \int_{I_j} f(u) v_x \mathrm{d}x + f(u_{j+\frac{1}{2}}) v^-_{j+\frac{1}{2}} - f(u_{j-\frac{1}{2}}) v^+_{j-\frac{1}{2}} = 0.$$

用有限元空间近似函数 u_h 和 v_h 代替函数 u 和 v,为了简单我们仍记为 u 和 v,则有方程的弱形式:求 $u \in U_h$,使得

$$\int_{I_j} v(u)_t \mathrm{d}x - \int_{I_j} f(u) v_x \mathrm{d}x + \left(\hat{f}_{j+\frac{1}{2}} v^-_{j+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{j-\frac{1}{2}} v^+_{j-\frac{1}{2}}\right) = 0,$$
$$\forall v \in U_h \tag{13.2}$$

成立. 其中数值流通量

$$\hat{f}_{j+\frac{1}{2}} = \hat{f}(u^-_{j+\frac{1}{2}}, u^+_{j+\frac{1}{2}}). \tag{13.3}$$

若取函数 v 为常数,不妨取为 $v = 1$,则有

$$\frac{1}{\Delta x_j} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{I_j} u \mathrm{d}x - \frac{1}{\Delta x_j} (f(u_{j+\frac{1}{2}}) v_{j+\frac{1}{2}} - f(u_{j-\frac{1}{2}}) v_{j-\frac{1}{2}}) = 0.$$

因为 $v_{j+\frac{1}{2}} = 1, v_{j-\frac{1}{2}} = 1$ 所以有

$$\frac{1}{\Delta x_j} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \int_{I_j} u \mathrm{d}x - \frac{1}{\Delta x_j} (\hat{f}_{j+\frac{1}{2}} - \hat{f}_{j-\frac{1}{2}}) = 0.$$

从上式可以看出,当基函数取为常数时,间断有限元方法可还原为有限体积方法. 一阶的间断 Galerkin 方法相当于一阶的有限体积方法.

2. 基函数及具体求解步骤

由于空间 U_h 中的函数是允许出现间断的,不同单元上的基函数可以相互无关,所以我们只需要在每一个小区间取局部基函数. 如对我们所考虑的守恒方程(13.1),可取如下形式的基函数

$$I_j = \{1, \xi, \cdots, \xi^k\}, \quad \xi = \frac{x - x_j}{\Delta x}, \ j = 1,2,\cdots,N, \tag{13.4}$$

则解 $u_h(x,t)$可表示为

$$u_h(x,t)=\sum_{l=1}^{k}u_j^l(t)\xi^l,x\in I_j,\tag{13.5}$$

实际在计算机中存储的是$\{u_j^l(t)\}$,$1\leqslant l\leqslant k,1\leqslant j\leqslant N$.

当然,这组基并不是最好的,它形成的质量矩阵复杂.我们可以选取,或者构造其他形式的正交基函数,使得质量矩阵对角化.

进一步,取 $v=\xi^m$,则

$$\sum_{l=0}^{k}\frac{\mathrm{d}u_j^l(t)}{\mathrm{d}t}\int_{I_j}\xi^l\xi^m\mathrm{d}x-\int_{I_j}f\Big(\sum_{l=0}^{k}u_j^l(t)\xi^l\Big)\frac{m}{\Delta x_j}\xi^{m-1}\mathrm{d}x$$
$$+\hat{f}_{j+\frac12}\Big(\frac12\Big)^m-\hat{f}_{j-\frac12}\Big(-\frac12\Big)^m=0.\tag{13.6}$$

设质量矩阵为 M,我们知道它是$(k+1)\times(k+1)$阶矩阵,且

$$M_{ml}=\Delta x\int_{-\frac12}^{\frac12}\xi^l\xi^m\mathrm{d}\xi,\tag{13.7}$$

进而易求 M^{-1}. 上式进一步可化为如下形式

$$M\cdot\begin{bmatrix}\mathrm{d}u_j^0(t)\\ \mathrm{d}u_j^1(t)\\ \vdots\\ \mathrm{d}u_j^k(t)\end{bmatrix}-\frac{1}{\Delta x_j}\begin{bmatrix}0\\ \int_{I_j}f(u_h)\mathrm{d}x\\ 2\int_{I_j}f(u_h)\xi\mathrm{d}x\\ \vdots\\ k\int_{I_j}f(u_h)\xi^{k-1}\mathrm{d}x\end{bmatrix}+\hat{f}_{j+\frac12}\begin{bmatrix}0\\ \frac12\\ \left(\frac12\right)^2\\ \vdots\\ \left(\frac12\right)^k\end{bmatrix}-\hat{f}_{j-\frac12}\begin{bmatrix}0\\ -\frac12\\ \left(-\frac12\right)^2\\ \vdots\\ \left(-\frac12\right)^k\end{bmatrix}=0.$$

至此,我们可以给出间断有限元方法的具体计算步骤:

(1) 求 M^{-1}.

(2) 计算线积分$\int_{I_j}f(u_h(x,t))\xi^m\mathrm{d}x$,它既可以准确计算,也可以利用 Gauss 等数值积分公式求解.

(3) 计算 $u_{j+\frac12}^-=\sum_{l=0}^{k}u_j^l\left(\frac12\right)^m$,$u_{j+\frac12}^+=\sum_{l=0}^{k}u_{j+1}^l\left(-\frac12\right)^m$,$\hat{f}_{j+\frac12}$.

3. 熵不等式

定理 13.1 对数值格式(13.2),我们有熵不等式(cell entropy ioequality)

$$U(u)_t+F(u)_x\leqslant 0,\quad U''(u)\geqslant 0.\tag{13.8a}$$

即在

$$-\int_0^{\infty}\int_0^{\infty}(U(u)\phi_t+F(u)\phi_x)\mathrm{d}x\mathrm{d}t\leqslant 0$$

意义下，有

$$\frac{1}{\Delta x}\int_{I_j}U(u)_t\mathrm{d}x+\frac{\hat{F}_{j+\frac{1}{2}}-\hat{F}_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta x}\leqslant 0,\tag{13.8b}$$

其中

$$U(u)=\frac{u^2}{2},\quad F(u)=\int^u U'(u)f'(u)\mathrm{d}u=\int^u uf'(u)\mathrm{d}u.\tag{13.8c}$$

证明　在(13.2)中取 $v=u$，则有

$$\int_{I_j}u_tu\mathrm{d}x-\int_{I_j}f(u)u_x\mathrm{d}x+\hat{f}_{j+\frac{1}{2}}u^-_{j+\frac{1}{2}}-\hat{f}_{j-\frac{1}{2}}u^+_{j-\frac{1}{2}}=0.$$

定义 $g(u)=\int^u f(u)\mathrm{d}u$，　$g'(u)=f(u)$，则

$$\int_{I_j}f(u)u_x\mathrm{d}x=\int_{I_j}g'(u)u_x\mathrm{d}x=\int_{I_j}g(u)_x\mathrm{d}x=g\left(u^-_{j+\frac{1}{2}}\right)-g\left(u^+_{j-\frac{1}{2}}\right).$$

所以(13.3)式可化为

$$\int_{I_j}\left(\frac{u^2}{2}\right)_t\mathrm{d}x-g\left(u^-_{j+\frac{1}{2}}\right)+g\left(u^+_{j-\frac{1}{2}}\right)+\hat{f}_{j+\frac{1}{2}}u^-_{j+\frac{1}{2}}-\hat{f}_{j-\frac{1}{2}}u^+_{j-\frac{1}{2}}=0.$$

由于

$$F(u)=\int^u uf'(u)\mathrm{d}u=-\int^u f(u)\mathrm{d}u+uf(u),$$

定义 $\hat{F}_{j+\frac{1}{2}}=-g(u^-_{j+\frac{1}{2}})+\hat{f}_{j+\frac{1}{2}}u^-_{j+\frac{1}{2}}$，则可验证相容性

$$\hat{F}_{j+\frac{1}{2}}(u,u)=-g(u)+f(u)u=F(u).$$

则有

$$\int_{I_j}U(u)_t\mathrm{d}x+\hat{F}_{j+\frac{1}{2}}-\hat{F}_{j-\frac{1}{2}}+\hat{F}_{j-\frac{1}{2}}+g\left(u^+_{j-\frac{1}{2}}\right)-\hat{f}_{j+\frac{1}{2}}u^+_{j-\frac{1}{2}}=0.$$

因此，下面只需要证明上式左端后三项非负，即证明

$$\hat{F}_{j-\frac{1}{2}}+g\left(u^+_{j-\frac{1}{2}}\right)-\hat{f}_{j+\frac{1}{2}}u^+_{j-\frac{1}{2}}\geqslant 0.$$

由于

$$\begin{aligned}g(u^+)-g(u^-)-\hat{f}(u^+-u^-)&=f(\xi)(u^+-u^-)-\hat{f}(u^+-u^-)\\&=[f(\xi)-\hat{f}(u^-,u^-)](u^+-u^-),\end{aligned}$$

其中 ξ 在 u^+ 和 u^- 之间：

(1) 如果 $u^+\geqslant u^-$，即 $u^+-u^-\geqslant 0$，$u^-\leqslant\xi\leqslant u^+$，利用 $\hat{f}$ 的单调性 $f(\uparrow,\downarrow)$，有

$$\hat{f}(\xi,\xi)-\hat{f}(u^-,u^+)=\hat{f}(\xi,\xi)-f(\xi,u^+)+f(\xi,u^+)-\hat{f}(u^-,u^+)\geqslant 0.$$

(2) 如果 $u^+<u^-$，则同样成立.

因此有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_{I_j}\left(\frac{u^2}{2}\right)\mathrm{d}x+\hat{F}_{j+\frac{1}{2}}-\hat{F}_{j-\frac{1}{2}}\leqslant 0.$$

由上式易得其 L_2 稳定性

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^1\left(\frac{u^2}{2}\right)\mathrm{d}x\leqslant 0.$$

若定义能量 $E(t)=\int_0^1\frac{u^2(x,t)}{2}\mathrm{d}x$，上式等价于 $E(t)\leqslant E(0)$.

4. 关于限制函数或限制器

DG (discontinuous Galerkin)方法的设计目标是使得

$$\mathrm{TV}(\bar{u}^{n+1})\leqslant\mathrm{TV}(\bar{u}^n)+O(h).\tag{13.9}$$

对我们所考虑的一维守恒律组，当基函数取为常数 1 时，得

$$\frac{\mathrm{d}\bar{u}_j}{\mathrm{d}t}+\frac{1}{\Delta x_j}(\hat{f}_{j+\frac{1}{2}}-\hat{f}_{j-\frac{1}{2}})=0,\quad \hat{f}_{j+\frac{1}{2}}=\hat{f}(u^-_{j+\frac{1}{2}},u^+_{j+\frac{1}{2}}).$$

我们希望引入限制器(limiter)，并利用 Harten 引理，构造 TVD 格式. 即调整 $u^-_{j+1/2}$和 $u^+_{j+1/2}$的值，在不影响光滑区域的精度的情况下，抑制非物理振荡. 令

$$\tilde{u}_j=u^-_{j+\frac{1}{2}}-\bar{u}_j,\quad \tilde{\tilde{u}}_j=\bar{u}_j-u^+_{j-\frac{1}{2}},$$

用 $\tilde{u}_j^{(\mathrm{mod})}=m(\tilde{u}_j,\Delta_+\bar{u}_j,\Delta_-\bar{u}_j)$代替 $\tilde{u}_j$，用 $\tilde{\tilde{u}}_j^{(\mathrm{mod})}=m(\tilde{\tilde{u}}_j,\Delta_+\bar{u}_j,\Delta_-\bar{u}_j)$代替 $\tilde{\tilde{u}}_j$，其中，m 是如下定义的 minmod 函数

$$m(a_1,a_2,\cdots,a_l)=\begin{cases}s\min_{1\leqslant n\leqslant l}|a_n|, & \text{当 } s=\mathrm{sign}(a_j),\\ 0, & \text{其他},\end{cases}\tag{13.10}$$

从而可以求得 $u^{-(\mathrm{mod})}_{j+1/2}$，$u^{+(\mathrm{mod})}_{j-1/2}$(参见(7.34)式).

下面证明引入限制器后，格式是 TVDM(total variation diminishing in the means)的，这是因为数值格式形式为

$$\frac{\mathrm{d}\bar{u}_j}{\mathrm{d}t}+\frac{1}{\Delta x_j}(\hat{f}_{j+\frac{1}{2}}-\hat{f}_{j-\frac{1}{2}})=0.$$

利用时间 Euler 前差

$$\bar{u}_j^{n+1}=\bar{u}_j^n-\lambda_j(\hat{f}_{j+\frac{1}{2}}-\hat{f}_{j-\frac{1}{2}}),\quad \lambda_j=\frac{\Delta t}{\Delta x_j},$$

则可利用 Harten 引理，有

$$
\begin{aligned}
&-\lambda_j[\hat f(u^-_{j+\frac12},u^+_{j+\frac12})-\hat f(u^-_{j-\frac12},u^+_{j-\frac12})]\\
=&-\lambda_j[\hat f(u^-_{j+\frac12},u^+_{j+\frac12})-\hat f(u^-_{j+\frac12},u^+_{j-\frac12})]-\lambda_j[\hat f(u^-_{j+\frac12},u^+_{j-\frac12})\\
&-\hat f(u^-_{j-\frac12},u^+_{j-\frac12})]\\
=&\,C_{j+\frac12}\Delta_+\bar u_j-D_{j-\frac12}\Delta_-\bar u_j,
\end{aligned}
$$

$$
C_{j+\frac12}=\frac{-\lambda_j[\hat f(u^-_{j+\frac12},u^+_{j+\frac12})-\hat f(u^-_{j+\frac12},u^+_{j-\frac12})]}{\Delta_+\bar u_j},
$$

$$
D_{j-\frac12}=\frac{\lambda_j[\hat f(u^-_{j+\frac12},u^+_{j-\frac12})-\hat f(u^-_{j-\frac12},u^+_{j-\frac12})]}{\Delta_-\bar u_j},
$$

由于 $\hat f$ 是 Lipschitz 连续的，所以

$$
C_{j+\frac12}\leqslant\frac{\lambda_jL_2\left|u^+_{j+\frac12}-u^+_{j-\frac12}\right|}{\left|\bar u_{j+1}-\bar u_j\right|}\leqslant\frac{\lambda_jL_2\left|\bar u_{j+1}-\tilde u_{j+1}-\bar u_j+\tilde u_j\right|}{\left|\bar u_{j+1}-\bar u_j\right|}.
$$

由于 $\tilde u_{j+1}$ 与 $\bar u_{j+1}-\bar u_j$ 同号，但其绝对值不大于 $\bar u_{j+1}-\bar u_j$ 的绝对值，同理，对 $\tilde u_j$ 也成立，因此有

$$
0\leqslant\frac{\bar u_{j+1}-\tilde u_{j+1}-\bar u_j+\tilde u_j}{\bar u_{j+1}-\bar u_j}\leqslant 1-\frac{\tilde u_{j+1}}{\bar u_{j+1}-\bar u_j}+\frac{\tilde u_j}{\bar u_{j+1}-\bar u_j}\leqslant 2.
$$

又利用数值流通量的单调性 $\hat f(\uparrow,\downarrow)$，所以

$$
0\leqslant C_{j+\frac12}\leqslant 2\lambda_jL_2.
$$

同理，可以得到 $0\leqslant D_{j-\frac12}\leqslant 2\lambda_jL_1$. 所以在满足 CFL 条件

$$
2\Delta t\left[\frac{L_2}{\Delta x_j}+\frac{L_1}{\Delta x_{j+1}}\right]\leqslant 1 \tag{13.11}
$$

时，我们有

$$
C_{j+\frac12}+D_{j+\frac12}\leqslant 2\lambda_jL_2+2\lambda_{j+1}L_1\leqslant 1
$$

至此，证明了修正后的格式仍为 TVD 的，并且是 TVDM 的.

下面的问题是，加入了修正限制后，对格式的精度是否存在影响？也就是说什么时候可能出现 $\tilde u_j^{(\mathrm{mod})}=\tilde u_j$，即 $\tilde u_j$，$\Delta_+\bar u_j$ 和 $\Delta_-\bar u_j$ 同号，且 $|\tilde u_j|\leqslant\min(|\Delta_+\bar u_j|,|\Delta_-\bar u_j|)$. 实际上

$$
\bar u_{j+1}-\bar u_j=u_{j+1}-u_j+O(h^2).
$$

这是因为，利用 Taylor 展开，我们有

$$
\frac1h\int_{x-\frac h2}^{x+\frac h2}u(\xi)\mathrm d\xi-u(x)
$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{h}\int_{x-\frac{h}{2}}^{x+\frac{h}{2}}\left(u(x)+u'(x)\xi+\frac{u''(x)}{2!}\xi^2+\frac{u^{(3)}(x)}{6}\xi^3+\cdots\right.\\
&\qquad\left.+\frac{u^{(k)}(x)}{k!}\xi^k-u(x)\right)\mathrm{d}x\\
&= O(h^2),\\
&\bar{u}_{j+1}-\bar{u}_j = u_{j+1}-u_j+O(h^2)=(u_x)_jh+O(h^2),\\
&\bar{u}_j-\bar{u}_{j-1} = u_j-u_{j-1}+O(h^2)=(u_x)_jh+O(h^2),\\
&\tilde{u}_j = u^-_{j+\frac{1}{2}}-\bar{u}_j = u_{j+\frac{1}{2}}-u_j+O(h^2)=\frac{1}{2}(u_x)_jh+O(h^2).
\end{aligned}
$$

因此,只要 $u_x\neq 0, h\ll 1$,即可得 $\tilde{u}_j, \Delta_-\bar{u}_j$ 和 $\Delta_+\bar{u}_j$ 同号,且 $|\tilde{u}_j|\leqslant\min(|\Delta_+\bar{u}_j|, |\Delta_-\bar{u}_j|)$,即 $\tilde{u}_j = m(\tilde{u}_j, \Delta_+\bar{u}_j, \Delta_-\bar{u}_j)$. 因此我们可以说,限制器在光滑且单调区域不影响格式的精度.

例题 证明对方程 $u_t+u_x=0$,利用上述限制器格式是 TVDM 型的.

证明 设

$$
\bar{u}_j = \frac{1}{\Delta x_j}\int_{I_j}u(x,t)\mathrm{d}x,
$$

数值格式为

$$
\frac{\mathrm{d}\bar{u}_j}{\mathrm{d}t}+\frac{1}{\Delta x_j}(\hat{f}_{j+\frac{1}{2}}-\hat{f}_{j-\frac{1}{2}})=0,
$$

其中 $\hat{f}_{j+\frac{1}{2}} = u^-_{j+\frac{1}{2}}$,则

$$
\begin{aligned}
\bar{u}_j^{n+1} &= \bar{u}_j^n-\lambda_j[\bar{u}_j+\tilde{u}_j-\bar{u}_{j-1}-\tilde{u}_{j-1}]\\
&= \bar{u}_j^n-\lambda_j\left[1+\frac{\tilde{u}_j}{\Delta_-\bar{u}_j}-\frac{\tilde{u}_{j-1}}{\Delta_-\bar{u}_j}\right](\bar{u}_j-\bar{u}_{j-1}).
\end{aligned}
$$

令,$D_{j-\frac{1}{2}} = 1+\dfrac{\tilde{u}_j}{\Delta_-\bar{u}_j}-\dfrac{\tilde{u}_{j-1}}{\Delta_-\bar{u}_j}$,则有

$$
0\leqslant\frac{\tilde{u}_j}{\Delta_-\bar{u}_j}\leqslant 1,\quad 0\leqslant\frac{\tilde{u}_{j-1}}{\Delta_-\bar{u}_j}\leqslant 1.
$$

当 $\dfrac{\Delta t}{\Delta x_j}\leqslant\dfrac{1}{2}$ 时,有 $0\leqslant\lambda_jD_{j-\frac{1}{2}}\leqslant 1$. 由 Harten 引理,可知格式是 TVDM 的.

进一步给出 TVB(total variation bounded)限制器满足

$$
\mathrm{TV}(\bar{u}(T))\leqslant\mathrm{TV}(\bar{u}(0))+O(1), \tag{13.12}
$$

此时,修正的 minmod 函数为

$$
\bar{m}(a_1,a_2,\cdots,a_l) = \begin{cases} a_1, & |a_1|\leqslant M\Delta_j^2,\\ m(a_1,a_2,\cdots,a_l), & \text{其他}, \end{cases} \tag{13.13}
$$

其中 M 是可调参数,从数学上来讲,$M\geqslant\frac{2}{3}\max\limits_x|u''_x(x)|$. 注意,如果 M 取

的太大,会产生振荡,如果 M 取的太小,格式在极值点附近会降低精度,所以 M 的选取具有问题依赖性.

5. 误差估计问题

假设 u_h 是间断 Galerkin 方法所得的近似解,u 是原偏微分方程的解,令 $e=u-u_h$ 表示误差,对于线性方程

$$\begin{cases} u_t + u_x = 0, \\ u(x,0) = u^0(x), \end{cases}$$

其中,函数 $u^0(x)$ 是光滑函数,我们有

定理 13.2　存在依赖于 k 和 t 的常数 c,使得

$$\| e(T) \|_{L^2} \leqslant c | u^0 |_{H^{k+2}} h^{k+1},$$

$$\| e(T) \|_{L^2} \leqslant c | u^0 |_{H^{k+1}} h^{k+\frac{1}{2}}.$$

证明　我们首先证明第二个不等式,它是一个比较弱的结果. 引进

$$B_h(u,v) = \int_0^T\int_0^1 u_t v \mathrm{d}x\mathrm{d}t - \int_0^T \sum_{j=1}^N \int_{I_j} u v_x \mathrm{d}x\mathrm{d}t - \int_0^T \sum_{j=1}^N u_{j+\frac{1}{2}}^- [v]_{j+\frac{1}{2}} \mathrm{d}t$$

其中 $[v]_{j+\frac{1}{2}} = v_{j+\frac{1}{2}}^+ - v_{j+\frac{1}{2}}$,并注意 $v_{j+\frac{1}{2}}^+ = [v]_{j+\frac{1}{2}}$, $v_{j+\frac{1}{2}} = -[v]_{j+\frac{1}{2}}$. 所以有

$$B_h(u,v) = 0, \quad \forall v \in V_h.$$

注意准确解 u 也满足上述数值格式,u 是光滑函数,具有直到 $k+2$ 阶连续导数,所以有

$$B_h(e,v) = 0, \quad \forall v \in V_h.$$

为证明定理结果,我们还需要下面的引理

引理

$$B_h(v,v) = \frac{1}{2}\| v(T) \|_{L^2}^2 - \frac{1}{2}\| v(0) \|_{L^2}^2 + \theta_T(v),$$

其中

$$\theta_T(v) = \frac{1}{2}\int_0^T \sum_{j=1}^N [v]_{j+\frac{1}{2}}^2 \mathrm{d}t.$$

证明

$$B_h(v,v) = \int_0^T\int_0^1 \left(\frac{v^2}{2}\right)_t \mathrm{d}x\mathrm{d}t - \int_0^T \sum_{j=1}^N \left[\frac{(v_{j+\frac{1}{2}}^-)^2}{2} - \frac{(v_{j-\frac{1}{2}}^+)^2}{2}\right]\mathrm{d}t$$

$$- \int_0^T \sum_{j=1}^N v_{j+\frac{1}{2}}^- [v^-]_{j+\frac{1}{2}} \mathrm{d}t$$

$$= \int_0^T\int_0^1 \left(\frac{v^2}{2}\right)_t \mathrm{d}x\mathrm{d}t + \int_0^T \sum_{j=1}^N \frac{v_{j+\frac{1}{2}}^- + v_{j+\frac{1}{2}}^+}{2}[v]_{j+\frac{1}{2}}\mathrm{d}t$$

$$- \int_0^T \sum_{j=1}^N v_{j+\frac{1}{2}}^-[v]_{j+\frac{1}{2}}\mathrm{d}t$$

$$= \int_0^T\int_0^1 \left(\frac{v^2}{2}\right)_t \mathrm{d}x\mathrm{d}t + \int_0^T \sum_{j=1}^N \frac{[v]_{j+\frac{1}{2}}}{2}[v]_{j+\frac{1}{2}}\mathrm{d}t$$

所以

$$0 = B_h(u_h, u_h) = \frac{1}{2}\| u_h(T)\|_{L^2}^2 - \frac{1}{2}\| u_h(0)\|_{L^2}^2 + \theta_T(u_h),$$

引理得证.

进一步有

$$\| u_h(T)\|_{L^2}^2 + 2\theta_T(v_h) = \| u_h(0)\|_{L^2}^2.$$

也就是说,L^2 模不增加,是稳定的,对函数值跳跃,有如下的控制

$$\int_0^T \sum_{j=1}^N \frac{[v]_{j+\frac{1}{2}}^2}{2}\mathrm{d}t \leqslant \| u_h(0)\|_{L^2}^2.$$

利用引理,设 P_he 是 e 的 L_2 投影,则有

$$B_h(P_h(e),P_h(e)) = \frac{1}{2}\| P_h(e)(T)\|^2 - \frac{1}{2}\| P_h(e)(0)\|^2 + \theta_T(P_h(e)),$$

$$B_h(P_h(e)-e,P_h(e)) = B_h(P_h(e),P_h(e)),$$

$$\| P_h(e)(0)\|^2 = \int_{I_j} P_h(e(0))\cdot P_h(e(0))\mathrm{d}x = \int_{I_j} P_h(e(0))\cdot e(0)\mathrm{d}x$$

$$= \int_{I_j} (u-u_h)_{(0)}P_h(e(0))\mathrm{d}x.$$

若取 $u_h(0)$为 $u(0)$的 L_2 投影,则 $\| P_h(e(0))\|^2=0$ 否则不为零,但取值比较小.

$$B_h(P_h(e)-e,P_h(e))$$

$$= \int_0^T\int_0^1 \frac{\partial}{\partial t}(P_h(e)-e)P_h(e)\mathrm{d}t\mathrm{d}x - \int_0^1\sum_{j=1}^N\int_{I_j} (P_h(e)-e)P_h(e)_x\mathrm{d}x$$

$$- \int_0^1\sum_{j=1}^N (P_h(e)-e)_{j+\frac{1}{2}}^-[P_h(e)]_{j+\frac{1}{2}}\mathrm{d}t.$$

注意

$$P_h(e)-e = P_h(u-u_h)-(u-u_h) = P_hu - P_hu_h - u + u_h = P_hu - u,$$

所以上式前两项为 0. 因此

$$|B_h(P_h(e)-e,P_h(e))| \leqslant \int_0^T \sum_{j=1}^N ((P_h(e)-e)_{j+\frac{1}{2}}^-)^2\mathrm{d}t$$

$$+\frac{1}{4}\int_0^T\sum_{j=1}^N[P_h(e)]_{j+\frac{1}{2}}^2\mathrm{d}t$$

$$=\int_0^T\sum_{j=1}^N((P_h(u)-u)_{j+\frac{1}{2}}^-)^2\mathrm{d}t+\frac{1}{4}\int_0^T\sum_{j=1}^N[P_h(e)]_{j+\frac{1}{2}}^2\mathrm{d}t$$

$$\leqslant\int_0^T ch^{2k+1}\sum_{j=1}^N|u|_{H^{k+1}(I_j,I_{j-1})}\mathrm{d}t+\frac{1}{2}\theta_T(P_h(e)).$$

从而，存在依赖于 k，T 的常数 c，使得

$$\|P_h(e(T))\|^2+\theta_T(P_h(e))\leqslant ch^{2k+1}|u|_{H^{k+1}},$$

$$\|e(T)\|\leqslant\|e(T)-P_h(e(T))+P_h(e(T))\|$$

$$\leqslant\|e(T)-P_h(e(T))\|+\|P_h(e(T))\|\leqslant ch^{k+\frac{1}{2}}|u|_{H^{k+1}}.$$

对于定理中的第一个不等式，即得到改进的误差阶，使之最优化，我们利用插值投影算子 $R_h(u)$代替 $P_h(u)$，$R_h(u)$是如下定义的：设$[-1,1]$区间上的 $k+1$ 个Gauss-Radau 点为

$$-1\leqslant x_0\leqslant x_1\leqslant\cdots\leqslant x_{k-1}\leqslant x_k=1,$$

并且对次数不超过 $2k$ 的多项式 $p(x)$准确成立

$$\int_{-1}^1 p(x)\mathrm{d}x=\sum_{j=0}^k w_jp(x_j).$$

而 $R_h(u)$就是惟一的 k 次多项式，使得

$$R_h(u)(x_j)=u(x_j),\quad j=0,1,\cdots,k,$$

$$\int_{-1}^1(R_h(u)-u)v\mathrm{d}x=0,$$

其中 u 是次数不超过 l 的多项式，而 v 是次数不超过 $2k-l$ 的多项式.

$$|B_h(R_h(e)-e,R_h(e))|\leqslant\int_0^T\int_0^1(R_h(u_t)-u_t)R_h(e)\mathrm{d}x\mathrm{d}t$$

$$-\int_0^T\sum_{j=1}^N\int_{I_j}(R_h(u)-u)R_h(e)_x\mathrm{d}x\mathrm{d}t,$$

利用逼近论可得其误差估计阶为 h^{k+1}，可得定义中第一式的证明.

13.2　二维守恒律问题的间断 Galerkin 有限元方法

考虑二维守恒律组

$$u_t+\nabla\cdot f(u)=0,\tag{13.14}$$

其中

$$x=(x_1,x_2)\in R^2,\quad f=(f_1,f_2)^{\mathrm{T}},\quad\nabla=\left(\frac{\partial}{\partial x_1},\frac{\partial}{\partial x_2}\right)$$

1. 单元离散和弱形式

令 K 表示剖分单元，e 表示单元 K 的边界，$n_{e,K}$ 表示单元 K 的边界 e 的外法向. 同样用连续函数 v 乘原方程的两端，并利用分部积分得

$$\int_K u_t v \mathrm{d}x - \int_K f(u) \cdot \nabla v \mathrm{d}x + \int_{\partial K} f(u) \cdot n v \mathrm{d}s = 0,$$

即原方程的弱形式为

$$\int_K (u_h)_t v_h \mathrm{d}x - \int_K f(u_h) \cdot \nabla v_h \mathrm{d}x + \sum_{l \in \partial K} \int_l \overline{f \cdot n_K}(u_h) v_h^- \mathrm{d}s = 0. \tag{13.15}$$

数值流通量$\overline{f\cdot n}$按照一维的取法，如

$$\hat{f}^{LF} = \frac{1}{2}[f(u^-) \cdot n + f(u^+) \cdot n - \alpha(u^+ - u^-)], \tag{13.16}$$

其中

$$\alpha = \max |(\nabla f(u) \cdot n)|.$$

$\overline{f\cdot n}$仍具有数值流通量的性质：

(1) 相容性 $\overline{f\cdot n}(u,u) = f(u)\cdot n$；

(2) 守恒性 $\overline{f\cdot n_K}(u^-, u^+) = \overline{f\cdot n_{K'}}(u^-, u^-), K \cap K' = e$；

(3) Lipschitz 连续性；

(4) 单调性 $\overline{f\cdot n}(\uparrow, \downarrow)$.

在单元 K 中取基函数 $\{\phi_1, \phi_2, \cdots, \phi_k\}$，则有限元解可表示为

$$u_h = \sum_{l=0}^{k} u_K^{(l)} \phi_l(x), x \in \mathrm{K}. \tag{13.17}$$

令 $u_k = (u_K^{(0)}, u_K^{(1)}, \cdots, u_K^{(k)})$，$(k+1)\times(k+1)$阶质量矩阵记为 M，且 $M_{ij} = \int_K \phi_i \phi_j \mathrm{d}x$，令 $A_{ij} = \int_K (\phi_{i,x_1}, \phi_{i,x_2}) \phi_j \mathrm{d}x$，则上述数值格式可写为

$$Mu - \begin{cases} \text{线性，当 } f(u) = (Au, Bu) \ Au_k \\ \text{非线性，利用 Gauss 数值积分} \end{cases} + \sum_{l \in \partial K} \begin{cases} \text{线性 } Bu_k + B' u_{k'} \\ \text{非线性，利用 Gauss 数值积分} \end{cases} = 0 \tag{13.18}$$

2. 限制器问题

对三角形剖分，如图 13.1 所示，在每一边的 Gauss 点或中点 m_1 处，设 $\bar{u}_K = u - \bar{u}_K$，并且从图中可以看出，有如下的线性组合

$$\overrightarrow{b_0 m_1} = \alpha_1 \overrightarrow{b_0 b_1} + \beta_1 \overrightarrow{b_0 b_2}, \alpha_1, \beta_1 \geqslant 0,$$

同时有

$$\overrightarrow{b_0 m_1} = -(\gamma_1 \overrightarrow{b_0 b_2} + \zeta_1 \overrightarrow{b_0 b_3}), \gamma_1, \zeta_1 \geqslant 0.$$

如果函数 u 是线性的,则同时有

$$\tilde{u} = \alpha_1(\bar{u}_{K_1} - \bar{u}_K) + \beta_1(\bar{u}_{K_2} - \bar{u}_K),$$

$$\tilde{u} = -\gamma_1(\bar{u}_{K_2} - \bar{u}_K) + \zeta_1(\bar{u}_{K_3} - \bar{u}_K),$$

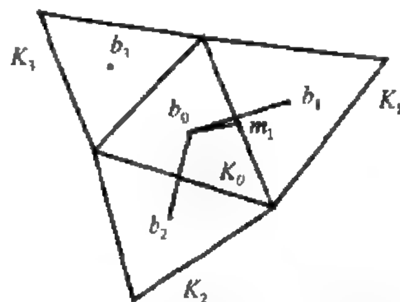


图 13.1　一个标准的三角形单元

则可利用

$$m(\tilde{u}, \xi(\alpha_1(\bar{u}_{K_1} - \bar{u}_K) + \beta_1(\bar{u}_{K_2} - \bar{u}_K)),$$
$$\xi(-\gamma_1(\bar{u}_{K_2} - \bar{u}_K) - \zeta_1(\bar{u}_{K_3} - \bar{u}_K)))$$

代替 $\tilde{u}$,这里 $\xi > 1$,如 $\xi = 1.5$. 这样选取限制器后,在光滑区域 $\tilde{u}$ 不受影响;而在极值点附近,精度降为一阶,为了克服精度降低的现象,可以选用 TVB 型限制器;$\bar{u}_h$ 满足最大模条件

$$\max_K(\bar{u}_h)_K^{n+1} \leqslant \max_K(\bar{u}_h)_K^n.$$

下面具体说明采用矩形剖分时的实际计算步骤.仍然考虑二维守恒律组

$$u_t + f(u)_x + g(u)_y = 0,$$

则有

$$\int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i-\frac{1}{2}}} u(x,y,t)_t v(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y - \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i-\frac{1}{2}}} f(u(x,y,t))v_x(x,y)$$
$$+ g(u(x,y,t))v_y(x,y)\mathrm{d}x\mathrm{d}y$$
$$+ \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \hat{f}(u(x_{i+\frac{1}{2}}^-, y, t), u(x_{i+\frac{1}{2}}^+, y, t))v(x_{i+\frac{1}{2}}^-, y, t)\mathrm{d}y$$
$$- \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \hat{f}(u(x_{i-\frac{1}{2}}^-, y, t), u(x_{i-\frac{1}{2}}^+, y, t))v(x_{i-\frac{1}{2}}^+, y, t)\mathrm{d}y$$
$$+ \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \hat{g}(u(x, y_{j+\frac{1}{2}}^-, t), u(x, y_{j+\frac{1}{2}}^+, t))v(x, y_{j+\frac{1}{2}}^-, t)\mathrm{d}x$$

$$-\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}\hat{g}(u(x,y_{j-\frac{1}{2}}^{-},t),u(x,y_{j-\frac{1}{2}}^{+},t))v(x,y_{j-\frac{1}{2}}^{+},t)\mathrm{d}x=0.$$

基函数我们可以如下选取,如

P^1;$1,\dfrac{x-x_i}{\Delta x_i/2},\quad\dfrac{y-y_j}{\Delta y_j/2}$.

P^2;$1,\dfrac{x-x_i}{\Delta x_i/2},\dfrac{y-y_j}{\Delta y_j/2},\dfrac{x-x_i}{\Delta x_i/2}\cdot\dfrac{y-y_j}{\Delta y_j/2},\left(\dfrac{x-x_i}{\Delta x_i/2}\right)^2-\dfrac{1}{3},\left(\dfrac{y-y_j}{\Delta y_j/2}\right)^2-\dfrac{1}{3}$.

不妨记上述基函数为 $\phi_1,\phi_2,\phi_3,\phi_4,\phi_5,\phi_6$,则质量矩阵元素为

$$M_{ij}=\sum_{l=1}^{6}u_{ij}^{(l)}(t)\iint\phi_i\phi_j\mathrm{d}x\mathrm{d}y.$$

下面定义限制器. 对于线性基函数,解 u 可以写为

$$u(x,y,t)=\bar{u}_{ij}+u_{xij}\phi_2+u_{yij}\phi_3,$$

则类似于一维情形,这样定义限制器:改变 u_{xij},u_{yij}的值,即

$$u_{xij}^{(\mathrm{mod})}=\min\bmod(u_{xij},\bar{u}_{i+1,j}-\bar{u}_{ij},\bar{u}_{ij}-\bar{u}_{i-1,j}),$$
$$u_{yij}^{(\mathrm{mod})}=\min\bmod(u_{yij},\bar{u}_{i,j+1}-\bar{u}_{ij},\bar{u}_{ij}-\bar{u}_{i,j-1}).$$

限制器既可以是 TVD 型,也可以是 TVB 型的. 对于二次基函数,我们有

$$u(x,y,t)=\bar{u}_{ij}+u_{xij}\phi_2+u_{yij}\phi_3+u_{xyij}\phi_4+u_{xxij}\phi_5+u_{yyij}\phi_6.$$

利用限制器改变 $u_{xij},u_{yij},u_{xyij},u_{xxij},u_{yyij}$的值:

在 x 轴方向,

$$\tilde{u}_{xij}=u_{j+\frac{1}{2}}^{-}-\bar{u}_{ij}=u_{xij}+\frac{2}{3}u_{xxij}-\frac{1}{3}u_{yyij},$$

$$\tilde{\tilde{u}}_{xij}=\bar{u}_{ij}-u_{i+\frac{1}{2},j}^{+}=u_{xij}-\frac{2}{3}u_{xxij}+\frac{1}{3}u_{yyij},$$

$$\tilde{u}_{xij}^{(\mathrm{mod})}=m(\tilde{u}_{ij},\bar{u}_{i+1,j}-\bar{u}_{ij},\bar{u}_{ij}-u_{i-1,j}),$$

$$\tilde{\tilde{u}}_{xij}^{(\mathrm{mod})}=m(\tilde{\tilde{u}}_{ij},\bar{u}_{i,j}-\bar{u}_{i-1,j},\bar{u}_{i+1,j}-\bar{u}_{i,j}).$$

同样在 y 轴方向有 $\tilde{\tilde{\tilde{u}}}$ 和 $\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{u}}}}$,且 $\tilde{u},\tilde{\tilde{u}},\tilde{\tilde{\tilde{u}}},\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{u}}}}$是 u_x,u_y,u_{xx},u_{yy}的函数.因此

$$\{u_x,u_{xx},u_y,u_{yy}\}\rightarrow\{\tilde{u},\tilde{\tilde{u}},\tilde{\tilde{\tilde{u}}},\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{u}}}}\}\xrightarrow{\text{limit}}\{\tilde{u}^{(\mathrm{mod})},\tilde{\tilde{u}}^{(\mathrm{mod})},\tilde{\tilde{\tilde{u}}}^{(\mathrm{mod})},\tilde{\tilde{\tilde{\tilde{u}}}}^{(\mathrm{mod})}\}$$
$$\xrightarrow{\text{反解}}\{u_x^{(\mathrm{mod})},u_{xx}^{(\mathrm{mod})},u_y^{(\mathrm{mod})},u_{yy}^{(\mathrm{mod})}\}.$$

对于项 u_{xy},如果在区间 I_{ij}内实施了 minmod 函数,则令 $u_{xy}=0$,否则保持不变.

13.3 对流-扩散问题的混合元方法

考虑一维对流占优的方程

$$u_t = u_{xx}, \tag{13.19}$$

初值 $u^0=\sin x$,其准确解为 $u(x,t)=\mathrm{e}^{-t}\sin x$,仍利用给出有限元弱形式的一般方法,用光滑函数 v 乘方程两端,得

$$\int_{I_j} v(u_t - u_{xx}) = 0.$$

利用分部积分公式整理得

$$\int_{I_j} u_t v\mathrm{d}x + \int_{I_j} u_x v_x \mathrm{d}x - \hat{u}_{x_{j+\frac{1}{2}}} v^-_{j+\frac{1}{2}} - \hat{u}_{x_{j-\frac{1}{2}}} v^+_{j-\frac{1}{2}} = 0.$$

如果直接取 $\hat{u}_{x_{j+1/2}} = \dfrac{1}{2}(u^+_{x_{j+1/2}} + u^-_{x_{j+1/2}})$,从数值模拟结果可以看出是不对的. 为了能求解这类方程,我们给出一种混合方法.

将方程 $u_t=u_{xx}$进一步写为

$$\begin{cases} u_t - q_x = 0, \\ q - u_x = 0. \end{cases} \tag{13.20}$$

因此有

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{I_j} v(u_t - q_x)\mathrm{d}x = 0, \\ \displaystyle\int_{I_j} w(q - u_x)\mathrm{d}x = 0. \end{cases} \tag{13.21}$$

进一步利用分部积分公式整理得

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{I_j} u_t v\mathrm{d}x + \int_{I_j} q v_x \mathrm{d}x - \hat{q}_{j+\frac{1}{2}} v^-_{j+\frac{1}{2}} + \hat{q}_{j-\frac{1}{2}} v^+_{j-\frac{1}{2}} = 0, \\ \displaystyle\int_{I_j} wq\mathrm{d}x + \int_{I_j} w_x u\mathrm{d}x - \hat{u}_{j+\frac{1}{2}} w^-_{j+\frac{1}{2}} + \hat{u}_{j-\frac{1}{2}} w^+_{j-\frac{1}{2}} = 0. \end{cases} \tag{13.22}$$

数值流通量可以采用 Bassi&Rebay 取法:

$$\begin{cases} \hat{q}_{j+\frac{1}{2}} = \dfrac{1}{2}(q^-_{j+\frac{1}{2}} + q^+_{j+\frac{1}{2}}), \\ \hat{u}_{j+\frac{1}{2}} = \dfrac{1}{2}(u_{j+\frac{1}{2}} + u^+_{j+\frac{1}{2}}), \end{cases} \quad \text{或} \quad \begin{cases} \hat{q}_{j+\frac{1}{2}} = q^-_{j+\frac{1}{2}}, \\ \hat{u}_{j+\frac{1}{2}} = u^+_{j+\frac{1}{2}}. \end{cases} \tag{13.23}$$

我们有稳定性结果

定理 13.3　$\| u(T) \|^2_{L^2} + 2\int_0^T \| q(t) \|^2_{L^2}\mathrm{d}t = \| u(0) \|^2_{L^2}.$　(13.24)

证明　在(13.22)中令 $v=u$, $w=q$,则有

$$\begin{cases} \displaystyle\int_{I_j} \left(\frac{u^2}{2}\right)_t \mathrm{d}x + \int_{I_j} q u_x \mathrm{d}x - \hat{q}_{j+\frac{1}{2}} u^-_{j+\frac{1}{2}} + \hat{q}_{j-\frac{1}{2}} u^+_{j-\frac{1}{2}} = 0, \\ \displaystyle\int_{I_j} q^2\mathrm{d}x + \int_{I_j} q_x u\mathrm{d}x - \hat{u}_{j+\frac{1}{2}} q^-_{j+\frac{1}{2}} + \hat{u}_{j-\frac{1}{2}} q^+_{j-\frac{1}{2}} = 0. \end{cases}$$

将上面两式相加，得

$$\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|u(t)\|_{L^2}^2+\|q(t)\|_{L^2}^2$$
$$+\sum_j\left[q_{j+\frac12}u^-_{j+\frac12}-q^+_{j-\frac12}u^+_{j-\frac12}-\hat{q}_{j+\frac12}u_{j+\frac12}+\hat{q}_{j-\frac12}u^+_{j-\frac12}-\hat{u}_{j+\frac12}q^-_{j+\frac12}\right.$$
$$\left.+\hat{u}_{j-\frac12}q^+_{j-\frac12}\right]=0,$$

进一步可写为

$$\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|u(t)\|_{L^2}^2+\|q(t)\|_{L^2}^2$$
$$+\sum_j\left[q^-_{j+\frac12}u^-_{j+\frac12}-q^+_{j+\frac12}u^+_{j+\frac12}-\hat{q}_{j+\frac12}u^-_{j+\frac12}+\hat{q}_{j+\frac12}u^+_{j+\frac12}-\hat{u}_{j+\frac12}q^-_{j+\frac12}+\hat{u}_{j+\frac12}q^+_{j+\frac12}\right]=$$
0.

而在 $x_{j+\frac12}$ 处，

$$q^-_{j+\frac12}u^-_{j+\frac12}-q^+_{j+\frac12}u^+_{j\ \frac12}-\hat{q}_{j+\frac12}u^-_{j+\frac12}+\hat{q}_{j+\frac12}u^+_{j+\frac12}-\hat{u}_{j+\frac12}q^-_{j+\frac12}+\hat{u}_{j+\frac12}q^+_{j+\frac12}$$
$$=q^-u^--q^+u^++\frac{1}{2}[-q^-u^--q^+u^-+q^+u^++q^-u^+-u^+q^--q^-u^-+q^+u^++q^+u^-]$$
$$=q^-u^--q^+u^+-q^-u^-+q^+u^+=0.$$

所以

$$\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|u(t)\|_{L^2}^2+\|q(t)\|_{L^2}^2=0.$$

上式对 t 积分，即得定理结果.

上述方法向二维推广做法和一维完全一样.

进一步考虑非线性对流扩散方程

$$u_t+(f(u))_x=(a(u)u_x)_x,\ a(u)\geqslant 0. \tag{13.25}$$

设 $q=\sqrt{a(u)}u_x=g(u)_x$，其中 $g(u)=\int^u\sqrt{a(u)}\,\mathrm{d}u$，则原方程化为

$$\begin{cases}u_t+f(u)_x-(\sqrt{a(u)}q)_x=0,\\ q-\sqrt{a(u)}u_x=0\quad 或\ q-g(u)_x=0.\end{cases} \tag{13.26}$$

间断 Galerkin 有限元方法的弱形式为：求 $u_h, q_h\in U_h$，使得

$$\int_{I_j}\partial_t u(x,t)v(x)\mathrm{d}x-\int_{I_j}f(u)\partial_x v(x)\mathrm{d}x+\int_{I_j}\sqrt{a(u)}qv_x\mathrm{d}x$$
$$+(\hat{f}_{j+\frac12}-(\sqrt{a(u^-)}q^-)_{j+\frac12})v^-_{j-\frac12}-(\hat{f}_{j+\frac12}-(\sqrt{a(u^-)}q^-)_{j-\frac12})v^+_{j-\frac12}=0 \tag{13.27}$$

及

$$\int_{I_j}q(x,t)w\mathrm{d}x-\int_{I_j}g(u)\partial_x w(x)\mathrm{d}x$$

$$- g(u^+_{j+\frac{1}{2}})w^+_{j+\frac{1}{2}} + g(u^+_{j-\frac{1}{2}})w^+_{j-\frac{1}{2}} = 0. \tag{13.28}$$

定理13.4

$$\frac{1}{2}\int_0^1 u^2(x,T)\mathrm{d}x + \int_0^T\int_0^1 q^2(x,t)\mathrm{d}x\mathrm{d}t \leqslant \frac{1}{2}\int_0^1 u^2(x,0)\mathrm{d}x. \tag{13.29}$$

13.4　守恒律方程组的间断有限元方法

仍考虑守恒律组

$$U_t + f(U)_x = 0, \tag{13.30}$$

其中

$$U = \begin{pmatrix} u_1 \\ u_2 \\ \vdots \\ u_m \end{pmatrix}, \quad f(U) = \begin{pmatrix} f_1(u_1,u_2,\cdots,u_m) \\ f_2(u_1,u_2,\cdots,u_m) \\ \cdots \quad \cdots \quad \cdots \\ f_m(u_1,u_2,\cdots,u_m) \end{pmatrix}. \tag{13.31}$$

矩阵

$$f'(U) = \frac{\partial f(U)}{\partial U} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial u_1},\cdots,\frac{\partial f_1}{\partial u_i},\cdots,\frac{\partial f_1}{\partial u_m} \\ \frac{\partial f_2}{\partial u_1},\cdots,\frac{\partial f_2}{\partial u_i},\cdots,\frac{\partial f_2}{\partial u_m} \\ \cdots \quad \cdots \quad \cdots \\ \frac{\partial f_m}{\partial u_1},\cdots,\frac{\partial f_m}{\partial u_i},\cdots,\frac{\partial f_m}{\partial u_m} \end{pmatrix} \tag{13.32}$$

有 m 个实的特征值和一个完备的特征向量组

$$\lambda_1(U) \leqslant \lambda_2(U) \leqslant \cdots \leqslant \lambda_m(U), \tag{13.33}$$

$$r_1(U), r_2(U), \cdots, r_m(U). \tag{13.34}$$

定义矩阵

$$R(u) = (r_1(U),\cdots,r_m(U)), R^{-1}(U)f'(U)R(U) = \Lambda(U), \tag{13.35}$$

其中 Λ 是特征值组成的对角矩阵，设 $l_i(U)$是矩阵 $f'(U)$的左特征向量，$R^{-1}(U)=(l_1(U),\cdots,l_m(U))^{-1}$为左特征向量组成的矩阵.

仍和 ENO 格式中的讨论一样，我们首先考虑线性方程组，电磁，声学中大部分都是这样的线性的方程组

$$U_t + AU_x = 0.$$

设 A 为常数矩阵，则具体步骤为：

(1) 求 A 的特征根和特征向量，记特征根组成的对角矩阵为 Λ，右特征

向量组成的矩阵为 R,相应的左特征向量组成的矩阵是 R^{-1}.

(2) 定义 $V=R^{-1}U=(v_1,\cdots,v_m)^{\mathrm{T}}$.

(3) 对每一个 v_l 的方程($l=1,2,\cdots,m$),利用标量格式.

(4) 用 $U=RV$,还原到原变量 U.

进一步,对于非线性方程组

$$U_t+f(U)_x=0,$$

可以将其改写为

$$U_t+A(U)U_x=0, A(U)=f'(U),$$

求 $R(U),R^{-1}(U),\Lambda(U),A(U)=R(U)\Lambda R^{-1}(U)$. 可得

$$U_t+R(U)\Lambda(U)R^{-1}(U)U_x=0,$$

$$R^{-1}(U)U_t+\Lambda(U)R^{-1}(U)U_x=0.$$

注意,对于数值流通量,经常采用近似的或准确的 Riemann 解,我们注意其单调性 $f(\uparrow,\downarrow)$只对标量情形成立,对方程组情形不适用.

对于上述非线性方程组,我们可以按如下步骤求解:

对每一个固定的 j,

(1) 计算平均值 $U_{j+\frac{1}{2}}$,如利用简单平均

$$U_{j+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}(\overline{U}_j+\overline{U}_{j+1}), U_{j+\frac{1}{2}}=\frac{1}{2}(U^-_{j+\frac{1}{2}}+U^+_{j+\frac{1}{2}}),$$

或利用 Roe 平均

$$U_{j+\frac{1}{2}}=U^{\mathrm{Roe}}(\overline{U}_j,\overline{U}_{j+1}), U_{j+\frac{1}{2}}=U^{\mathrm{Roe}}(U^-_{j+\frac{1}{2}},U^+_{j+\frac{1}{2}}),$$

满足

$$f(\overline{U}_{j+1})-f(\overline{U}_j)=f'(U^{\mathrm{Roe}}(\overline{U}_j,\overline{U}_{j+1}))(\overline{U}_{j+1}-\overline{U}_j).$$

(2) 计算 $R_{j+1/2},R^{-1}_{j+1/2},\Lambda_{j+1/2}$,使得 $A(U_{j+1/2})=R_{j+1/2}\Lambda R^{-1}_{j+1/2}$,为简单仍记为 R,R^{-1}和 Λ.

(3) 计算如下各式

$\overline{V}_j=R^{-1}\overline{U}_j$, $\overline{V}_{j+1}=R^{-1}\overline{U}_{j+1}$, $\overline{V}_{j-1}=R^{-1}\overline{U}_{j-1}$,

$\overline{V}_{j+2}=R^{-1}\overline{U}_{j+2}$, $V^+_{j+\frac{1}{2}}=R^{-1}U^+_{j+\frac{1}{2}}$, $V^-_{j+\frac{1}{2}}=R^{-1}U^-_{j+\frac{1}{2}}$.

(4) 对 V 的各个分量利用限制器(略去分量的下标)

$$\tilde{v}_j=v^-_{j+\frac{1}{2}}-\overline{v}_j, \tilde{\tilde{v}}_{j+1}=\overline{v}_{j+1}-v^+_{j+\frac{1}{2}},$$

$$\tilde{v}_j^{(\mathrm{mod})}=\min\mathrm{mod}(\tilde{v}_j,\Delta_+\overline{v}_j,\Delta_-\overline{v}_j),$$

$$\tilde{\tilde{v}}_{j+1}^{(\mathrm{mod})}=\min\mathrm{mod}(\tilde{\tilde{v}}_{j+1},\Delta_+\overline{v}_{j+1},\Delta_-\overline{v}_{j+1}),$$

从而求得 $v^{-(\mathrm{mod})}_{j+\frac{1}{2}},v^{+(\mathrm{mod})}_{j+\frac{1}{2}}$.

(5) 回到原变量 U, $U^{+(\mathrm{mod})}_{j+\frac{1}{2}}=RV^{+(\mathrm{mod})}_{j+\frac{1}{2}}$, $U^{-(\mathrm{mod})}_{j+\frac{1}{2}}=RV^{-(\mathrm{mod})}_{j+\frac{1}{2}}$.

(6) 继续前面的过程.

注释

1) 对一维系统,如果不利用边界点上的值 $u_{j+1/2}, R_{j+1/2}, R_{j+1/2}^{-1}, \Lambda_{j+1/2}$,而可以利用区间上的值 $\bar{u}_j, R_j, \Lambda_j, R_j^{-1}$,计算量相同,但相对来讲第一种要好.

2) 对二维系统,如 $u_t + f(u)_x + g(u)_y = 0$,取 $f'(u)$的特征根和特征向量 $R^x, \Lambda^x, (R^x)^{-1}$,在 x 方向同样利用前面讨论的特征领域的限制器. 同样,取 $g'(u)$的特征根和特征向量 $R^y, \Lambda^y, (R^y)^{-1}$,在 y 方向利用前面讨论的特征领域的限制器.

3) 边界条件.

(1) 周期边界条件.

(2) 固壁或对称边界条件.

(3) 入流(inflow)、出流(outflow)条件.

(4) 无反射边界条件.

4) $u_t = u_{xx}$的另一种方法:Bauman-Oden-Babuska 方法.

有一种直观但不正确的逼近方法:

$$\int_{I_j} u_t v \mathrm{d}x + \int_{I_j} u_x v_x \mathrm{d}x - \hat{u}_{x,j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}^- + \hat{u}_{x,j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}}^+ = 0, \quad (13.36)$$

$$\hat{u}_{x,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(u_{x,j+\frac{1}{2}}^- + u_{x,j+\frac{1}{2}}^+).$$

这种格式,误差总是只有"0"阶精度. 对全域叠加(13.36)式

$$\int_0^1 u_t v \mathrm{d}x + \sum_j \int_{I_j} u_x v_x \mathrm{d}x + \sum_j \hat{u}_{x,j+\frac{1}{2}} [v]_{j+\frac{1}{2}} = 0,$$

做 L_2 稳定性分析,可得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\int_0^1 \frac{u^2}{2}\mathrm{d}x + \sum_j \int_{I_j} (u_x)^2 \mathrm{d}x + \sum_j \hat{u}_{x,j+\frac{1}{2}} [u]_{j+\frac{1}{2}} = 0.$$

利用有限元的对称性,并做适当的改进,得

$$\int_0^1 u_t v \mathrm{d}x + \sum_j \int_{I_j} u_x v_x \mathrm{d}x + \sum_j \hat{u}_{x,j+\frac{1}{2}} [v]_{j+\frac{1}{2}} - \sum_j \hat{v}_{x,j+\frac{1}{2}} [u]_{j+\frac{1}{2}} = 0.$$

此时,数值格式为

$$\int_{I_j} u_t v \mathrm{d}x + \int_{I_j} u_x v_x \mathrm{d}x - \hat{u}_{x,j+\frac{1}{2}} v_{j+\frac{1}{2}}^- + \hat{u}_{x,j-\frac{1}{2}} v_{j-\frac{1}{2}}^+$$
$$- \frac{1}{2} v_{x,j+\frac{1}{2}} (u_{j+\frac{1}{2}}^+ - v_{j+\frac{1}{2}}^-) - \frac{1}{2} v_{x,j-\frac{1}{2}} (u_{j-\frac{1}{2}}^+ - u_{j-\frac{1}{2}}^-) = 0.$$

由于矩阵是不对称的,所以逼近多项式只能从 p^1 开始. Bauman-Oden-Babuska 方法和 LDG(local discontinuous Galerkin)方法相比,没有可调性,并且理论

估计困难些. 具体精度对比如下:

逼近多项式次数	Bauman-Oden-Babuska 方法精度	LDG 方法精度
P^0		1
P^1	2	2
P^2	2	3
P^3	4	4
P^4	4	5

13.5　二维可压缩流体的间断 Galerkin 有限元方法

考虑涡流函数方程(vorticity-stream function formulation)

$$\begin{cases} w_t + uw_x + vw_y = 0, \\ \Delta\psi = w, \\ u = -\psi_y, v = \psi_x, \end{cases} \tag{13.37}$$

w 是涡函数,$\vec{u}=(u,v)$是速度,ψ 是流函数. 不可压条件为 $u_x+u_y=0$,传播速度无限.

有限元剖分记为 T_h,剖分单元为 K,有限元空间为

$$w_h \in V_h^k = \{v: v|_k \in P^k(K),\quad \forall K \in T_h\}, \tag{13.38}$$

$$\psi_h \in V_h^k \cap C^0(\Omega). \tag{13.39}$$

记$\langle\cdot,\cdot\rangle_K=\int_K \cdot\, \mathrm{d}x$,而对于第一个方程,我们利用 DGM,数值格式为

$$\langle\partial_t w_h, v\rangle_K - \langle w_h, \vec{u}_h\cdot(\nabla v)\rangle_K + \sum_{e\in\partial K}\langle\vec{u}_h\cdot n\hat{w}_h v^-\rangle_e = 0, \tag{13.40}$$

$$\forall v \in V_h,$$

其中,在单元内部积分用到了不可压条件$\nabla\cdot\vec{u}_h=0$,$\vec{u}_h\cdot n$ 穿过单元边界 e 是连续的.

$$\hat{w}_h = \begin{cases} w_h^-, & 若\ \vec{u}_h\cdot n > 0, \\ w_h^+, & 若\ \vec{u}_h\cdot n \leqslant 0. \end{cases} \tag{13.41}$$

利用 Lax-Friedrish 流通量(以下为简便,省略 $\vec{u}_h$ 上的天头符号):

$$\begin{aligned} u_h\cdot n\hat{w}_h &= \frac{1}{2}[u_h\cdot n(w_h^+ + w_h^-) - \alpha(w_h^+ - w_h^-)], \\ \alpha &= \max|u_h\cdot n|. \end{aligned} \tag{13.42}$$

进一步,可以利用传统有限元处理

$$\begin{cases}\Delta\psi = w,\\ u = \Delta^{\perp}\psi,\end{cases}$$

即设试验函数为 $\varphi\in W_{0,h}^{k}$,则

$$-\langle\nabla\psi,\nabla\varphi\rangle = \langle w_h,\nabla\varphi\rangle.$$

因此,对此不可压的涡流形式的方程(13.37),我们有如下格式:

$$\begin{cases}\langle\partial_t w_h,v\rangle_K - \langle w_h u_h\cdot\nabla v\rangle_K + \sum\limits_{e\in\partial K}\langle u_h\cdot n\,\hat{w}_h v^-\rangle_e = 0, & \forall v\in V_h^k,\\ -\langle\nabla\psi,\nabla\varphi\rangle = \langle w_h,\nabla\varphi\rangle, & \forall\varphi\in W_{0,h}^k,\\ \qquad u_h = \nabla^{\perp}\psi_h, & \end{cases}\tag{13.43}$$

首先考虑稳定性,为此在(13.43)中取 $v = w_h$,得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{1}{2}\|w_h\|_K^2 - \frac{1}{2}\big\langle\nabla\cdot(w_h^2\cdot u_h)\big\rangle_K + \sum_{e\in\partial K}\big\langle u_h\cdot n\hat{w}_h w_h^-\big\rangle_e = 0.$$

进一步整理得

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{1}{2}\|w_h\|_K^2 + \sum_{e\in\partial K}\Big\langle u_h\cdot n\Big(\hat{w}_h w_h^- - \frac{1}{2}(w_h^-)^2\Big)\Big\rangle_e = 0.$$

记

$$\bar{w} = \frac{1}{2}(w^+ + w^-),\ [w] = w^+ - w^-,\ w^- = \bar{w} - \frac{1}{2}[w],\ (w^-)^2 = \bar{w}^2 - \bar{w}[w],$$

则

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{1}{2}\|w_h\|_K^2 + \sum_{e\in\partial K}\Big[u_h\cdot n\Big(\hat{w}_h\bar{w}_h - \frac{1}{2}\bar{w}_h^2\Big)\Big]_e + \frac{1}{2}\sum_{e\in\partial K}\langle u_h\cdot n[w_h](\bar{w}_h - \hat{w}_h)\rangle_e = 0.$$

所以有

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|w_h\|^2\begin{cases}= 0, & 若\ \hat{w}_h = \bar{w}_h,\\ \leqslant 0 & 若\ \hat{w}_h\ 是迎风型的,\end{cases}$$

即焓(enthalphy damping).

进一步在(13.43)中取 $v = \psi_h\in V_h^k$,得

$$\langle\partial_t w_h,\psi_h\rangle_K - \langle w_h,u_h\cdot\nabla\psi_h\rangle_K + \sum_{e\in\partial K}\langle u_h\cdot n\hat{w}_h\psi_h\rangle_e = 0.$$

上式左端第二项为 0,第三项整体取值也为 0,所以有

$$\langle\partial_t w_h,\psi_h\rangle = 0.$$

进一步,由于 $\Delta\psi = w$, $-\langle\nabla\psi,\nabla\psi\rangle = \langle w,\psi\rangle$ 有

$$-\langle\partial_t w_h\psi_h\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{1}{2}\|\nabla\psi_h\|^2 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|u_h\|^2 = 0,$$

所以有能量守恒(energy conservation)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\|u_h\|^2=0.$$

误差估计

1. 对 $w_h\in V_h^k,\psi_h\in V_h^k\cap C_0(\Omega)$,有

$$\|u-u_h\|+\|w-w_h\|\leqslant ch^k$$

对 u 是最优的,而对 w 不是最优的.

2. 对 $w_h\in V_h^k,\psi_h\in V_h^{k+1}\cap C_0(\Omega)$,有

$$\|u-u_h\|+\|w-w_h\|\leqslant ch^{k+\frac{1}{2}}.$$

练习题

1. 利用间断 Galerkin 方法编写程序求解方程

$$\begin{cases}u_t+u_x=0,\\ u(x,0)=\sin x,\end{cases}$$

其中 $0\leqslant x\leqslant 2\pi$,方程的准确解为 $u(x,t)=\sin(x-t)$,分别利用分段常数,线性和二次多项式作为基函数,取 $\hat{f}_{j+1/2}=u_{j+1/2}^-$,时间离散利用三阶 TVD Runge-Kutta 时间离散格式,CFL 条件为 $\frac{\Delta t}{\Delta x}\leqslant 0.1$,网格剖分数分别为 $N=10,20,40,80,160$,计算到时间 $t=6$,并给出下面两种模意义下的误差估计:

(1) L_2 模误差估计:$\sqrt{\frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi}(u(x,t)-u_h(x,t))^2\mathrm{d}x}$;

(2) 在点 x_j 处的最大模:$\max\limits_{1\leqslant j\leqslant N}|u(x_j,t)-u_h(x_j,t)|$.

2. 对于如下的 θ-格式

$$\int_{I_j}\frac{u^{n+1}-u^n}{\Delta t}v\mathrm{d}x-\int_{I_j}f(\theta u^{n+1}+(1-\theta)u^n)v_x\mathrm{d}x+\hat{f}_{j+\frac{1}{2}}^{n+\theta}v_{j+\frac{1}{2}}^- -\hat{f}_{j-\frac{1}{2}}^{n+\theta}v_{j-\frac{1}{2}}^+=0$$

中 $0\leqslant\theta\leqslant 1$,证明当 $\theta\geqslant\frac{1}{2}$,

$$\hat{f}_{j+\frac{1}{2}}^{n+\theta}=\hat{f}((\theta u^{n+1}+(1-\theta)u^n)^-,(\theta u^{n+1}+(1-\theta)u^n)^+)$$

时,有熵不等式

$$\frac{U(u^{n+1})-U(u^n)}{\Delta t}+\frac{\hat{F}_{j+\frac{1}{2}}-\hat{F}_{j-\frac{1}{2}}}{\Delta x_j}\leqslant 0,$$

其中 $\hat{F}_{j+\frac{1}{2}}=\hat{F}((u_{j+\frac{1}{2}}^{n+1})^-,(u_{j+\frac{1}{2}}^{n+1})^+,(u_{j+\frac{1}{2}}^n)^-,(u_{j+\frac{1}{2}}^n)^+)$.

3. 利用间断 Galerkin 方法编写程序求解具有如下初值的方程

$$\begin{cases} u_t + u_x = 0, & 0 \leqslant x \leqslant 2\pi \\ u(x,0) = \begin{cases} 1, & \dfrac{2}{3}\pi < x \leqslant \dfrac{4}{3}\pi \\ 0, & \text{其他}. \end{cases} \end{cases}$$

4. 利用间断 Galerkin 方法编写程序求解具有如下间断初值的方程

$$\begin{cases} u_t + u_x = 0, & 0 \leqslant x \leqslant 2\pi, \\ u(x,0) = \begin{cases} 1, & \dfrac{2}{3}\pi < x \leqslant \dfrac{4}{3}\pi, \\ 0, & \text{其他}. \end{cases} \end{cases}$$

注意分别加入 TVB 和 TVD 型的限制器，这里可取 $M = 2, 10, 50$，并比较所得结果.

5. 求解具有周期边界条件的二维守恒方程 $u_t + u_x + u_y = 0, (x,y) \in [0,2\pi] \times [0,2\pi]$，初值分别为

(1) $u^0(x,y) = \sin(x+y)$，其准确解为 $u(x,y,t) = u^0(x-t, y-t)$.

(2) 在 $2\pi \times 2\pi$ 矩形区域内，有一以点 (π,π) 为圆心，半径为 $\frac{2}{3}\pi$ 的圆，在圆内，函数取值为 1，在圆外函数取值为 0. 分别给出当基函数取零次，一次，二次多项式，在无限制器和分别加入 TVD 型、TVB 型限制器的情形下，画出二维等值线(contour)和一维截面图(cut)，并分别给出最大模和 L_2 模误差估计.

6. 利用 DGRKFEM (discontinuous Galerkin Runge-Kutta finite element method) 求解如下具有周期边界条件的对流扩散方程

$$\begin{cases} u_t + u_x = \varepsilon u_{xx}, & 0 \leqslant x \leqslant 2\pi \\ u(x,0) = \sin x, \end{cases}$$

分别利用 P^0, P^1, P^2 次多项式作为基函数，ε 分别取 0.01 和 1，网格剖分数分别为 $N = 20, 40, 60, 80$，计算时间为 $t = 1$，给出 L_2 模误差估计和收敛阶，并比较讨论 CPU 时间.

第十四章　时空有限元方法

通过前面几章的讨论,我们已经可以看到标准有限元方法对于时间依赖问题的解,一般仅仅进行空间解域的单元剖分. 利用 Runge-Kutta 方法求解(空间离散型)常微分方程组,或者进而采用时间离散求解线性代数方程组(全离散型),最终得到数值近似解.

时空有限元方法(time-space FEM)是专为解决时间依赖问题,特别是间断解的一种新型、重要的有限元方法. 也可以称为流线扩散有限元方法(streamline diffusion method,简称为 SDM)[108]. 从数学角度来讲,SDM 是对标准 Galerkin 有限元法的一种修正,属于 Petrov-Galerkin 有限元方法. 通过给 Galerkin 有限元法的检验函数添加了一个适当的最小二乘项,使 SDM 增强了格式的数值稳定性,从而基本上消除了数值伪振荡的产生机制. 对单个方程来讲,它等价于在流线方向上施加适当的人工黏性. 从力学角度来看,SDM 可视做一种特殊的迎风型算法,它通过检验函数的适当选择,人工黏性主要施加在迎风方向上,减少了侧风效应,提高了方法的分辨率.

本章的内容包括:首先阐述 SDM 的数值实现方法,在此基础给出简单的稳定性分析和误差估计,表明 SDM 的良好特性;最后,简略回忆 SDM 的发展过程和展望未来.

14.1　流线扩散法的数值实现

SDM 是求解类双曲问题的一种高效的新型有限元方法,具有很广泛的应用背景. 所谓的类双曲问题,包括双曲问题(如守恒律)和对流占优的扩散问题. 以下主要讨论对流占优的扩散问题;如不特别声明,所有讨论对双曲型问题依旧有效.

考虑简单的模型方程

$$u_t + \beta u_x - (\varepsilon u_x)_x + u = f(x), \quad 0 < x < 1, 0 < t < T, \tag{14.1a}$$

$$u(x,0) = u_0(x), \quad 0 \leqslant x \leqslant 1, \tag{14.1b}$$

$$u(0,t) = u(1,t) = 0, \quad 0 < t < T, \tag{14.1c}$$

其中常数 $0<\varepsilon \ll |\beta|$. 该条件表明问题(14.1)是对流占优的.

求解发展型问题的 SDM 基于所谓的时空(time-space)有限元空间,即有限元空间的基函数在空间方向上是连续的,但在时间方向上是允许间断的. 因此说,SDM 是一种隐式算法. 以问题(1.1)为例,时空有限元空间的构造如

下：

对将时间域$[0,T]$作剖分：$0=t_0<t_1<\cdots<t_N=T$，剖面 $t=t_n$ 将求解区域$\bar{D}=[0,1]\times[0,T]$分割为 N 个条形区域

$$\bar{S}_n = [0,1]\times[t_{n-1},t_n], n = 1,2,\cdots,N. \tag{14.2}$$

对每个 $\bar{S}_n$ 独立地作剖分(示意图如下)，单元通记为 K. 记

$$T_n = \{K : K\in\bar{S}_n\}, T = \bigcup_{n=1}^{N} T_n, h = \max_{K\in T}\operatorname{diam} K, \tag{14.3}$$

称 T 为$\bar{D}$ 的时空有限元剖分，h 为其网格参数. 在 T_n 与 T_{n+1}的公共界面 $t=t_n(n=1,2,\cdots,N-1)$，剖分可以是两重的，即 T_n 与 T_{n+1}的网点在该时间层上可以不一致. 这样处理给有限元网格的构造带来了极大的灵活性，尤其是求解双曲型问题时.

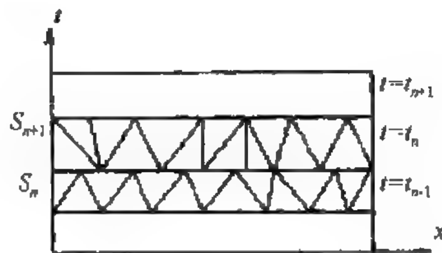


图 14.1　时空有限元的单元剖分

用 $P_r(K)$表示单元 K 上次数不超过 r 的多项式集合，定义

$$V_h^n = \{v\in H_1(S_n)\cap C(\bar{S}_n), v|_{\partial\Omega\times[t_{n-1},t_n]} = 0, v|_K\in P_r(K), \forall K\in T_n\},$$

$$V_h = \bigcup_{n=1}^{N} V_h^n, (n = 1,2,\cdots,N).$$

显然 V_h 为$\bar{D}$ 上按 T 的分片 r 次多项式空间，其元素 v 关于 $x\in[0,1]$连续，但关于 t 仅按$[t_{n-1},t_n](n=1,2,\cdots,N)$分段连续，关于在公共界面 $t=t_n$ 上，一般来说是间断的. 为了表述简洁，我们引进如下一些记号：

$$(w,v)_n \equiv (w,v)_{S_n} = \int_{S_n} wv\mathrm{d}x, \qquad \|v\|_n^2 \equiv \|v\|_{S_n}^2 = (v,v)_n,$$

$$(v_\pm)_n \equiv v_\pm(\cdot,t_n) = \lim_{s\to 0_\pm} v(\cdot,t_n+S), \quad [v]_n \equiv (v_-)_n - (v_-)_n,$$

$$\langle w_\pm, v_\pm\rangle_n \equiv (w_\pm(\cdot,t_n), v_\pm(\cdot,t_n)), \mid v_\pm\mid_n \equiv \langle v_\pm, v_\pm\rangle_n$$

$$w_\beta \equiv \beta w_x, Aw \equiv (\varepsilon w_x)_x.$$

按照参考文献[122～125]，求解问题(14.1)的 SDM 定义如下：对

$$(U_t^n + U_\beta^n + U^n, v+\delta(v_t+v_\beta))_n + (\varepsilon U_x^n, v_x)_n - (AU^n, \delta(v_t+v_\beta))_n$$
$$+\langle U_+^n, v_+\rangle_{n-1} = (f, v+\delta(v_t+v_\beta))_n + \langle U_-^{n-1}, v_+\rangle_{n-1},$$
$$n=1,2,\cdots,N,$$

依次求解 $U^n \in V_h$，使得

$$\forall v \in V_h, n = 1, 2, \cdots, N; \tag{14.4a}$$

$$U_-^0 = u_0, \tag{14.4b}$$

其中 $\delta > 0$ 为适当选定的人工扩散参数，可如下选取

$$\delta = \begin{cases} \delta_1 = v_1 h, & 若\ \varepsilon_0/\beta_1 \leqslant h, \\ \delta_2 = v_2 h^2, & 若\ \varepsilon_0/\beta_1 > h, \end{cases}$$

其中 v_1, v_2 的具体选择见下文(参见[214]).

注 对 SDM 格式中的 $(AU^n, \delta(v_t + v_\beta))_n$ 项，应理解为在 T_n 中所有单元 K 上的内积之和；这里的人工扩散参数 $\delta > 0$ 是 K 的函数，本章取为常数仅仅为了陈述便捷. (14.4b)中的 U_-^0 仅具符号意义，是

$$(AU^n, \delta(v_t + v_\beta))_n \equiv \sum_{K \in T_n} (AU^n, \delta(v_t + v_\beta))_K.$$

SDM 格式启动的初值.

我们特别关注 SDM 格式中选取 $\delta = \delta_1$ 的情况. 求解对流占优扩散问题时，因技术条件的限制，我们经常遇到无法选取充分细的网格，故而讨论 $\delta = \delta_1$ 更有实用意义. 对 $\delta = \delta_2$ 的情况，SDM 已非常接近 Galerkin 有限元方法. 下文我们仅讨论当 $\delta = \delta_1$ 时 SDM 格式的稳定性和误差估计.

14.2 稳定性分析

为讨论方便，先给出 SDM 的等价形式. 置

$$B_n(w, v) \equiv (w_t^n + w_\beta^n + w^n, v + \delta(v_t + v_\beta))_n + (\varepsilon w_x^n, v_x)_n$$
$$- (Aw^n, \delta(v_t + v_\beta))_n + \langle [w], v_+ \rangle_{n-1},$$

$$B(w, v) = \sum_{n=1}^{N} B_n(w, v).$$

注意到 $(w, v)_D = \sum_{n=1}^{N} (w, v)_n$，和 V_h 在 S_n 上的限制为 V_h^n，易知 SDM 的等价形式是：对给定的 $U^0 = u_0$，求 $U \in V_h$ 使得

$$B(U, v) = (f, v + \delta(v_t + v_\beta))_D, \quad \forall v \in V_h. \tag{14.5}$$

下面讨论 SDM 的稳定性分析. 首先可建立如下重要引理.

引理 14.1 设 V_h 具有有限元逆性质，对 $\forall v \in V_h$ 和 $v_-^0 \in L^2([0,1])$，可适当选取 $\delta = \delta_1$，使得

$$|(Av^n, \delta(v_t + v_\beta))| \leqslant \frac{1}{2}\varepsilon \| v_x \|^2 + \frac{\delta}{4} \| v_t + v_\beta \|^2. \tag{14.6}$$

【证明】 利用有限元逆性质和仿射变换技巧，由 Green 公式可证引理

14.1. 有兴趣的读者可参考[214],本处省略.

引理 14.1 的证明过程中指出了人工扩散参数的选取范围:无论是对

$$\begin{cases} \delta \leqslant 1, \\ \mu(1+|\beta|)\delta \leqslant h/8, \\ \gamma^2\delta_\varepsilon \leqslant h^2/4, \end{cases}$$

$\delta=\delta_1$,还是 $\delta=\delta_2$,均要求其满足如下限制:其中 μ,γ 为有限元空间 V_h 的逆常数,即对任意的 $v\in V_h$ 和 $K\in T$,有

$$\| v_{xx} \| + \| v_{xt} \| \leqslant \mu h^{-1} \| v_x \|, \quad | v |_{1,\partial K} \leqslant \sqrt{\gamma h^{-1}}\, | v |_{1,K}.$$

利用引理 14.1 的结论,可得如下重要引理. 它是 SDM 格式稳定性分析的基础.

引理 14.2　在引理14.1的条件下,对 $\forall\, v\in V_h$ 和 $v_-^0\in L^2([0,1])$,成立

$$(v^0, v_+)_0 + B(v,v) \geqslant \frac{1}{2} ||| v |||_\beta^2, \tag{14.7}$$

其中

$$||| v |||_\beta^2 = \| v \|_D^2 + \varepsilon \| v_x \|_D^2 + \delta \| v_t + v_\beta \|_D^2 + \sum_{n=1}^{N-1} |[v]|_n^2 + | v_- |_N^2 + | v_+ |_0^2.$$

SDM 格式的稳定性分析结果,可总结为如下定理.

定理 14.1　在引理14.2的条件下,SDM 格式的数值解存在且惟一,并具有良好的稳定性估计

$$||| U |||_\beta^2 \leqslant C\{ \| f \|_D^2 + \| u_0 \|_{[0,1]}^2 \}, \tag{14.8}$$

其中界定常数 C 与 ε^{-1},h 无关.

定理 14.1 表明 SDM 比间断 Galerkin 有限元方法具有更强的数值稳定性. 如当 $\varepsilon\approx\beta h^3$ 时,由定理 14.1 可知 SDM 的稳定性估计为

$$\| U \|_D^2 + h \| U_t + U_\beta \|_D^2 \leqslant C\{ \| f \|_D^2 + \| u_0 \|_{[0,1]}^2 \}, \tag{14.9}$$

而间断 Galerkin 有限元方法仅有

$$\| U \|_D^2 + h^3 \| U_t + U_\beta \|_D^2 \leqslant C\{ \| f \|_D^2 + \| u_0 \|_{[0,1]}^2 \}, \tag{14.10}$$

因此说,SDM 具有良好的数值稳定性,可有效抑制数值振荡的出现.

14.3　SDM 的误差分析

SDM 在保持良好的数值稳定性的同时,还具有理想的高阶精度. 由于该方法的特点和效能,SDM 日益引起数值分析和工程计算各行专家学者的重

视,并被广泛地应用到流体计算等领域.

定理 14.2 设问题(1.1)的解 $u \in H_{r+1}(D) \cap C(\bar{D})$,则在引理 14.2 的条件下,对 SDM 格式的数值解 U,有如下的误差估计

$$|||u-U|||_\beta \leqslant Ch^{r+\frac{1}{2}} \| u \|_{r+1,D}, \qquad \text{对 } \delta=\delta_1,$$
$$|||u-U|||_\beta \leqslant Ch^{r} \| u \|_{r+1,D}, \qquad \text{对 } \delta=\delta_2,$$

其中界定常数 C 与 ε^{-1}, h 无关.

从定理 14.2 的两个估计来看,似乎当 $\delta=\delta_2$ 时 SDM 格式的误差阶更高,但注意到 $\|\cdot\|_\beta$ 的定义可知,无论是哪种情况,SDM 格式沿流线方向的误差按模 $\|(U-u)_t+(U-u)_\beta\|$ 仍是 $O(h^r)$,均是丰满的. 值得我们关注的是,对 $\delta=\delta_1$ 时,SDM 的 $L^2(D)$模误差为 $O(h^{r+\frac{1}{2}})$,虽不是丰满的,但比传统的数值方法具有更高的精度. 对于对流占优扩散问题,或双曲型方程,该误差阶估计在一般网格下是最优的.

14.4 SDM 的发展历史

在 70 年代后期的有限元研究中,一种常用的途径是通过对检验函数作某种修正,来改善求解对流扩散问题时标准 Galerkin 方法的数值稳定性. 这类方法常隶属于 Petrov-Galerkin 框架. 最初,较为成功的格式是由 O.C. Zienkwicz 提出的,它的基本思想是对基函数加上适当的非对称函数修正来实现. 该方法能够很好地处理一维问题,但难于推广到高维问题. 同时,它也引进了过多的数值黏性.

为求解定常对流扩散问题,Hughes 和 Brook 在 1979 年中提出了 SUPG (streamline upwind Petrov-Galerkin)方法[107]. 该方法可非常简单地推广到高维问题. 其具体的理论分析由 Johnson 和 Navert[120,122]最先给出,并重新命名为 SDM. 随后,利用时空有限元空间,C. Johnson 和他的合作者[124~127]将 SDM 推广到发展型问题,并相继应用于各种类双曲问题,如 Euler 方程和 Navier-Stockes 问题.

自诞生以来,SDM 已经获得长足的发展. 无论是格式的理论分析、具体应用,还是格式的完善,SDM 均有了很多成果.

理论分析方面,主要集中在对 SDM 的误差分析. 前文所介绍的定理14.2 是格式的整体误差分析,实际上更能体现 SDM 优势的是局部误差分析. SDM 具有所谓的局部误差影响特征,参见[120,107,166]. 换言之,即使问题的真解含有间断或大梯度变化区域,SDM 在真解光滑区域并不降低数值解的精度,上述影响被局限在很狭小的范围内. 在 SDM 中,扰动像连续问题一样沿

特征线传播. 精确地讲,位于点 P 上的扰动,将沿着迎风方向以 $e^{-d/Ch}$ 的速度衰减,而沿着侧风方向以 $e^{-d/C\sqrt{h}}$ 的速度衰减,其中 d 表示某点到点 P 的距离. 这意味坏的影响仅局限在沿特征线宽为 $O(\sqrt{h}\log(1/h))$ 的狭窄区域内.

由于 SDM 不是单调格式或保持单调格式,故仍有时会不可避免地产生一些微小振荡(overshooting or undershooting). 为此,Hughes 为求解定常问题也提出激波捕捉技术,以增加格式在间断或激波附近的数值耗散. 具有激波捕捉技术的 SDM 是非线性的,即使是求解线性问题. 而后,Johnson 将该技术推广到非定常问题(参见[68,128]). 其思想是,通过对 SDM 加上适当的可控人工黏性,黏性的大小局部地依赖有限元解的残量大小.

90 年代以来,C. Johnson 还考虑了 SDM 的自适应技术(参见[125,126]),通过相应的后验估计来调整网格的分布;P. Hansbo 还将特征线技术与 SDM 相结合(参见[86]),对不同层的网格生成提供了一个好的策略.

14.5　SDM 的其他形式

诚如前面所介绍的,SDM 求解对流占优扩散问题是基于时空有限元空间. 这样作,虽可以很好地协调时间和空间方向的流场,理论分析比较容易进行,但却付出了一定的代价——巨大的 CPU 时间和存储空间,尤其是应用于高维问题时. 采用时空有限元的 SDM 求解非线性问题时,导致非线性的计算格式的迭代求解;此外,在 SDM 的误差估计(定理 14.2)中假定真解 $u\in H_{r+1}(D)\cap C(\bar{D})$,其光滑性要求过高.

为克服 SDM 方法在应用中的困难,孙澈教授[214]在 90 年代初期提出了差分流线扩散法(finite-difference streamline diffusion method,简称 FDSD 方法). 其基本思想是对时间和空间方向分别采用差分和有限元方法:对时间变量采用不同的有限差分离散,而对空间变量则采用 SDM 有限元近似. 这样作,将全离散有限元方法的简便性和 SDM 的优点结合起来,简化了 SDM 方法的计算工作量. 尽管 FDSD 方法的思想比较简单,但其理论分析却比 SDM 方法更为复杂.

下面仍以问题(14.1)为例,来阐明 FDSD 方法的基本思想.

为构造 FDSD 格式,须剖分时间域$[0,T]$:

$$0=t_0<t_1<\cdots<t_N=T,$$

记

$$\tau_n=t_n-t_{n-1},\ \tau=\max_{1\leqslant n\leqslant N}\tau_n,\ \bar{\partial}_t w^n=(w^n-w^{n-1})/\tau_n,\ w^n=w(t^n).$$

此时不需要考虑时空区域 D 的剖分,而仅需对空间域$[0,1]$作剖分:

$$0=x_0<x_1<\cdots<x_M=1, K_i=[x_{i-1}, x_i],$$
$$h_i=x_i-x_{i-1}, h=\max_{1\leqslant i\leqslant M} h_i.$$

构造有限元空间

$$V_h^n=\{v\in H_1^0([0,1])\cap C([0,1]), v|_{K_i}\in P_r(K_i), \forall K_i\}.$$

为了书写方便,我们引进如下两个算子:

$$L_n(W,V)\equiv(\bar{\partial}_t W^n+\beta W_x^n+W^n, V+\delta\beta V_x^n)$$
$$+(\varepsilon W_x^n, V_x^n)-((\varepsilon W_x^n)_x, \delta\beta V_x^n),$$
$$F_n(V)\equiv(f^n, V+\delta\beta V_x^n),$$

其中$(w,v)=\int_{[0,1]} wv\mathrm{d}x$ 是空间上的内积,相应的范数为 $\|\cdot\|$.

求解问题(14.1)的 FDSD 格式定义如下:对 $n=1,2,\cdots,N$,依次求解 $U^n\in V_h$,使得

$$L_n(U,V)=F_n(V), \forall V\in V_h, \tag{14.11}$$

其中初值 $U^0\in V_h$ 适当选取,以满足精度要求. 这里,$\delta>0$ 仍为人工扩散参数,满足如下的限制.

由于问题(14.1)是对流占优的,经常遇到的情形是 $\varepsilon\leqslant|\beta|h$. 此时

$$\begin{cases}\mu|\beta|\delta\leqslant h/8,\\ \gamma^2\delta_\varepsilon\leqslant h^2/32,\end{cases}$$

取人工扩散参数为 $\delta=\upsilon h$ 的形式,其中 $\upsilon>0$ 与 h 和 ε^{-1} 无关.

对 FDSD 格式可建立与 SDM 类似的稳定性分析和误差估计. 有兴趣的读者可参见[214,215].

定理 14.3 当时间步长 τ 适当小时,FDSD 格式的数值解存在且惟一,并成立如下的稳定性估计

$$\max_{1\leqslant n\leqslant N}\|U^n\|^2+\delta\sum_{n=1}^N\|\bar{\partial}_t U^n+\beta U_x^n\|^2\tau+\varepsilon\sum_{n=1}^N\|U_x^n\|^2\tau$$
$$\leqslant C\left\{\sum_{n=1}^N\|f^n\|^2\tau+\|U^0\|^2\right\},$$

其中界定常数与 h,τ 和 ε^{-1} 无关.

定理 14.4 设问题(14.1)的真解 u 具有如下的光滑性

$$u\in L_\infty(H_{r+1}\cap H_1^0), \quad u_t\in L_2(H_{r+1}), \quad u_{tt}\in L_2(L_2).$$

当时间步长 τ 适当小时,FDSD 格式的数值解 U 满足如下的误差估计

$$\max_{1\leqslant n\leqslant N}\|e^n\|^2+\delta\sum_{n=1}^N\|\bar{\partial}_t e^n+\beta e_x^n\|^2\tau+\varepsilon\sum_{n=1}^N\|e_x^n\|^2\tau$$
$$\leqslant C(\varepsilon h^{2r}+h^{2r+1}+\tau^2),$$

其中 $e^n = u^n - U^n$,界定常数 C 与 h,τ 和 ε^{-1}无关.

我们还将 FDSD 方法推广到非线性问题,有兴趣的读者可参见[256,257].

小结　SDM 方法是求解对流扩散问题的一种高效有限元方法,它具有良好的数值稳定性和高阶精度. 在 Petrov-Galerkin 算法的框架下,SDM 巧妙地将人工黏性主要施加到迎风方向上,具有很好的应用前景. FDSD 方法在保持 SDM 的特点前提下,简化了 SDM 的计算工作量,是一个值得继续研究的课题.

六、运动界面追踪问题的数值方法篇

在现实中存在着大量的所谓活动边界问题(moving boundary problems,又称 Stefan 问题),以及活动界面追踪(interface tracking)问题. 人们最为关注的是活动边界和界面的位置等特征. 因而,模拟和追踪它们的轨迹和发展,就成了解决这类问题的关键. 如:液体流动的自由面(free surface),特别是水波在岸边的爬升和破碎;爆炸、燃烧的气体界面(shock, contact discontinuity);冰融化、水结冰的活动边界(moving boundary);以及石油开采中的地下油水两相流界面(interfaces),以及化学和生物工程的晶体生长界面,材料加工工业中的浇注成型中的固化界面,等等.

当然,前面各章所介绍的许多数值方法,也可以用来计算和模拟这类活动边界问题.其实我们以前介绍的间断解的各种方法也是这样作的. 但是,就像我们刚刚所说,如果人们特别关注的是其中的运动边界轨迹、特征和发展,那么寻求一种抓住主要矛盾,突出问题关键,多快好省的方法就是非常有意义的了. 多年来,已经有许多从事科学和工程计算的工作者和专家,在这方面做出了巨大的努力和贡献. 对于这类方法,今天我们都统一地称之为界面追踪方法(interface tracking,或者 front tracking).

现在出版的世界著名数值方法和计算物理刊物,例如 J. Computational Physics, International J. Numerical Methods in Fluids 等,甚至每一期都有数篇涉及 interface tracking 的论文. 可以说在今天,它不仅是计算物理和计算数学所日益关注的研究课题,而且也引起结晶化学、材料成型和加工技术研究的关注. 在这一篇里,我们将简单地介绍有关这方面的发展和应用. 我们只能简单地介绍有关这方面的发展和应用. 我们特意提供相当多的参考文献,有兴趣的读者可以进一步去学习和研究.

第十五章　VOF 方法和运动界面的重构方法

最早处理自由面问题的有效方法,是 Harlow 和 Welch 等人提出的格子(cell-type)类方法[87,246]. 这类方法在 Euler 网格上进行差分离散,在网格中布置若干标记点(marker)或者流体质点(particle)来标记流体. 它是通过这些标记点或质点的追踪,来模拟自由面的大体位置的. 网格是 Eulerian 型的,固定不动,然而标记点却随流体运动,是 Lagrangian 型的. 在格子类(cell-type)

方法中,最著名的有 PIC、MAC 和 FLIC 等.

PIC(particle in cell)[70]最早是 Evans 和 Harlow 于 1957 年提出的. 标记点是有质量、动量、能量的流体质点. 先在 Euler 网格上进行无输运的计算,再利用面积加权平均估计出标记点的速度,然后对标记点作 Lagrangian 型移动,从而达到对自由面的追踪. 而后 Gentry,Martin 和 Daly 对 PIC 方法进行简化和创新,提出了 FLIC(fluid in cell)方法[80]. 它不引入标记点,不记录和追踪标记点,首先计算压力梯度的贡献,不考虑输运,第二步再计算网格间的输运量. 现在的 VOF(volume of fluids)方法实质上也是在这种方法的基础上发展起来的. 但是 PIC 方法需要存储每个质点的物理量,存储量很大.

而后,1965 年 Harlow 和 Welch 提出的 MAC(marker and cell)方法采用无质量、动量、能量,只有坐标位置的点,来表示流体的特征面,存储量大大减小. 数学模型方程进行 Euler 型、非一致格点配置(staggered mesh)差分离散得到基本方程的有限差分格式. 计算过程分为三步:第一步是通过这种差分格式由 $t=t_n$ 时间的状态量$(u,v,p,\cdots)^n$,计算出 $t=t_{n+1}$时间的状态量$(u,v,p,\cdots)^{n+1}$. 第二步,标志点的追踪. 标记点(markers)将按照所处的格子内的位置(x_j^n,y_j^n),利用面积加权求出该标志点在 $t=t_{n+1}$时刻的运动方向和速度,从而实现 Lagrange 追踪计算. 最后,利用得到的 $t=t_{n+1}$时刻的标志点的位置,进行输运计算,并重构 $t=t_{n+1}$时刻的自由面的几何形状,同时也确定下一时刻的流体实际计算区域.

这类方法能给出自由面的粗糙近似,但不能给出更加细致的描述,如自由面的斜率、曲率等. 更主要的是计算仍需要较大的存储量,特别对于三维情形尤为突出.

在这一章里,我们不再讨论格子类方法.有兴趣的读者可以参考作者的早期的专著《计算流体动力学》. 这里将介绍由 Hirt 和 Nichols(1981)[102]首先提出的 VOF (volume of fluid)方法,和首先由 Osher 和 Sethian(1988)[169]提出的 level set method 等方法.

15.1　流体体积函数(VOF)方法[148]

20 世纪 70 年代末,Hirt 和 Nichols 等提出 VOF(volume of fluid)方法. VOF 方法是在整个流场中定义一个函数 C,在每个网格中,这个函数定义为一种流体(我们称之为目标流体)的体积与网格体积的比值. 不包含这种流体的网格称为“空”网格,充满这种流体的网格称为满网格,包含界面的网格称为半网格. 在任意时刻,知道了这个函数在每个网格上的值,也就可以通过某种途径构造运动界面. 然后求解物理方程时可以在界面附近作特殊的精细处

理,以提高分辨率和精度.

设计算区域是 Ω,流体 A 所在的区域记为 Ω^1,而流体 B 所在的区域记为 Ω^2. 首先定义这样一个函数

$$\alpha(\vec{x},t)=\begin{cases}1, & \vec{x}\in\Omega^1,\\ 0, & \vec{x}\in\Omega^2.\end{cases}$$

对于两种不相溶的流体组成的流场,$\alpha(\vec{x},t)$满足

$$\frac{\partial\alpha}{\partial t}+u\frac{\partial\alpha}{\partial x}+v\frac{\partial\alpha}{\partial y}=0, \tag{15.1}$$

其中 $\vec{V}=(u,v)$是流体的速度场. 现在在每个网格 I_{ij}(以矩形网格为例)上定义 C_{ij}为 $\alpha(\vec{x},t)$在网格上的积分

$$C_{ij}=\frac{1}{\Delta V_{ij}}\int_{I_{ij}}\alpha(\vec{x},t)\mathrm{d}V$$

我们称之为 VOF(volume of fluid)函数. 同样它满足

$$\frac{\partial C}{\partial t}+u\frac{\partial C}{\partial x}+v\frac{\partial C}{\partial y}=0, \tag{15.2}$$

这个方程称为 VOF 方程.

容易看出每个单元上的流体体积函数实际上是

$$C=\frac{\text{单元中的流体体积}}{\text{单元体积}}. \tag{15.3}$$

显然,$C=1$ 的网格充满流体 A,我们称之为流体网格(fluid);而 $C=0$ 为空网格(void);那些 $0<C<1$ 的网格,则是含有流体界面的网格,称为界面网格(surface). 在每个网格中的 C 一旦求出,则可以根据 C 的值构造各种各样的自由面. 由于每个网格只保存一个 C 值,可以大大减少存储量. 根据某种规则和周边的网格的 C 值,可以计算自由面的斜率、曲率,给出自由面的更精确的描述.

只要求出 C,就可以构造出每个网格上的自由面,然后进行控制方程的离散求解. 由于 VOF 方法中,每个网格只需记录一个 C 值,与 MAC 方法相比大大降低了存储量.

VOF 方法就是通过求解 VOF 函数,实现对运动界面的追踪. 由于 VOF 函数是有物理意义的,它是网格中一种流体所占整个网格的体积比,我们虽然知道它满足的方程,但在求解方程(15.2)时,要保持它的这一物理意义是困难的. 我们的求解格式首先应该是守恒的,而且每一时间步得到的函数值跨过界面从 1 变到 0,或从 0 变到 1,在运动界面附近形成一个"带子",只有在这个"带子"内 VOF 函数 $0<C<1$. 为了得到清晰的物质界面,并在求解物理方程时提高分辨率,这个"带子"一定不可以太宽. 也就是要保持 VOF 函数只有在

含有界面的网格上才会大于 0，小于 1．在其他网格上必须是 1 或 0．

15.2　流体体积方程的求解

为了很好的求解 VOF 方程，出现了许多构造性的方法．由已知的 VOF 函数构造出运动界面的近似，然后由流体的输运特性，构造下一时刻的 VOF 函数值．比较著名的 VOF 界面重构方法有最先提出 VOF 概念的 Nichols 和 Hirt 的直线近似方法，在一个网格内，用水平或竖直的直线近似该网格内的界面；FLAIR 两网格上斜直线近似方法，就是在相邻的两个网格上用有斜率的直线逼近界面；Youngs 的单个网格内的斜直线近似，在单个网格上构造有斜率的直线逼近界面；Kim 等人提出的二次曲线近似方法，在以当前网格为中心的 9 个网格上用二次曲线近似界面．

1．Hirt 和 Nichols 的直线近似

Hirt 和 Nichols 设计了类似于 MAC 和 PIC 方法的 Staggered 型差分格式，即 p_{ij}^n，C_{ij}^n 定义在（或者配置在）格子的中心处，x 方向的速度定义在格子的左右格边中点，而 y 方向的速度定义在格于的上下格边中点．

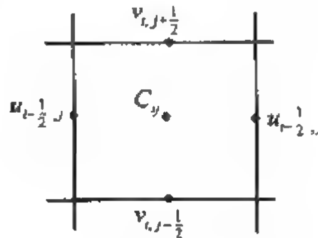


图 15.1　非一致的变量配置的 Staggered 格子

采用 Donor-Acceptor 的差分逼近格式计算运动界面的流体体积函数方程，由于流体是不可压的，方程(15.1)等价于

$$\frac{\partial C}{\partial t}+\frac{\partial (Cu)}{\partial x}+\frac{\partial (Cv)}{\partial y}=0. \tag{15.4}$$

施主－受主方法不仅仅考虑本网格上的流体体积函数，而且要用到相邻网格上的流体体积函数，以此来提高分辨率．取控制体（仅考虑空间二维情况）

$$\Omega=(x_{i-1/2},x_{i+1/2})\times(y_{j-1/2},y_{j+1/2})\times(t_n,t_{n+1}), \tag{15.5}$$

将方程(15.2)在其上进行积分，得到：

$$(C^{n+1}-C^n)\delta x\delta y+\Delta(Cu)\delta t\delta y+\Delta(Cv)\delta t\delta x=0. \tag{15.6a}$$

定义

$$\Delta(Cu)\delta t=\min\{C_{AD}\mid V_x\mid+C_f,C_D\delta x_D\}, \tag{15.6b}$$

其中

$$C_f = \max\{(1.0 - C_{AD}) | V_x | - (1.0 - C_D)\delta x_D, 0\},$$

$$| V_x | = | u \cdot \delta t |,$$

下标 A, D 分别表示受主、施主单元. $AD = A$ 或 D,由单元内自由面的方向和单元边界上的速度方向决定,C_A, C_D 分别表示受主、施主单元上的流体体积函数. $\Delta(Cv)\delta t$ 的构造方法类似.

作者的另一个重大贡献,还在于提出了一种重构的方案. 无疑对于运动界面追踪的数值方法而言,这是一个新的开端. 这里特别针对的是自由面的重构问题. 将流体自由面看做局部的单值函数 $Y(x)$或 $X(y)$, 采用 9 个网格的模板(如图 15.2),计算 $i-1, i, i+1$ 网格列的 Y_l值和$j-1, j, j+1$ 网格列 X_l 值,估算出每个网格上自由表面的斜率值 dY/dx, dX/dy,然后根据流体体积函数和斜率的大小确定网格(i, j)上的自由面位置和方向. 即

$$Y_l = \sum_{k=j-1}^{j+1} F_{lk}\delta y_k, l = i-1, i, i+1, \tag{15.7a}$$

$$\left(\frac{dY}{dx}\right)_i = \frac{2(Y_{i+1} - Y_{i-1})}{\delta x_{i+1} + 2\delta x_i + \delta x_{i-1}}, \tag{15.8a}$$

$$X_l = \sum_{k=i-1}^{i+1} F_{kl}\delta x_k, l = j-1, j, j+1, \tag{15.7b}$$

$$\left(\frac{dX}{dy}\right)_j = \frac{2(X_{j+1} - X_{j-1})}{\delta y_{j+1} + 2\delta y_j + \delta y_{j-1}}. \tag{15.8b}$$

理论上讲,以上两个导数应该互为倒数,但数值计算结果则不然. 作者的策略是比较它们的绝对值大小,来决定自由面在该网格内是“水平”的呢,还是“竖直”的? 即,如果

$$\left|\frac{dY}{dx}\right| < \left|\frac{dX}{dy}\right|, \tag{15.9}$$

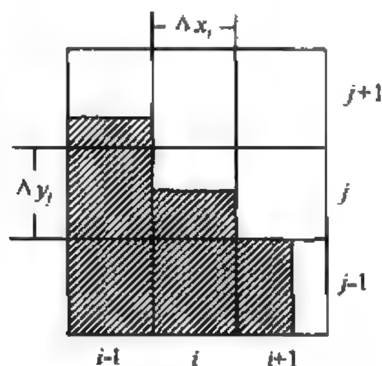


图 15.2 自由面重构的 Hirt-Nichols 方案

则定义自由面是水平的,否则,自由面是竖直的. 如图 15.2 所示. 这也就是说,Hirt 等的重构方案,仅仅是"零"阶自由面格式. 尽管非常简单,但是它确实起到了抛砖引玉的开创性作用;而且对于一些要求不高的运动界面来说,这种重构方式已经可以达到目的.

2. FLAIR 界面重构技术

1991 年 Ashgriz&Poo 的 FLAIR(flux line-segment model for advection and interface reconstruction) 技术[7]就采用斜直线段近似界面. 对任意网格边界的两个相邻网格,构造一条直线段作为跨过该网格边界的界面近似. 然后可以计算一个时间步内流过该网格边界的流体体积量,作为修改流体体积函数的数值流通量. 由于界面构造涉及到两个网格,需要分成许多种情形分别计算. 利用网格边界的流体速度,确定施主单元和受主单元,其流体体积函数分别用 C_D,C_A 表示. 然后可分为以下几种:

(1) 施主网格是满网格,即 $C_D=1.0$;

(2) 施主网格是空网格,即 $C_D=0.0$;

(3) 施主网格是半网格,受主网格也是半网格,即

$$0<C_D<1.0, 0<C_A<1.0;$$

(4) 施主网格是半网格,受主网格是满网格或空网格,即

$$0<C_D<1.0, C_A=0.0 \text{ 或 } C_A=1.0.$$

前两种情形较简单. 第三种情形又可分为 16 种情形,经过简单的转换可以归结为 4 种,即 $f_a \geqslant f_b$ 且目标流体在界面以下,如图 15.3 所示. 作一条直线跨

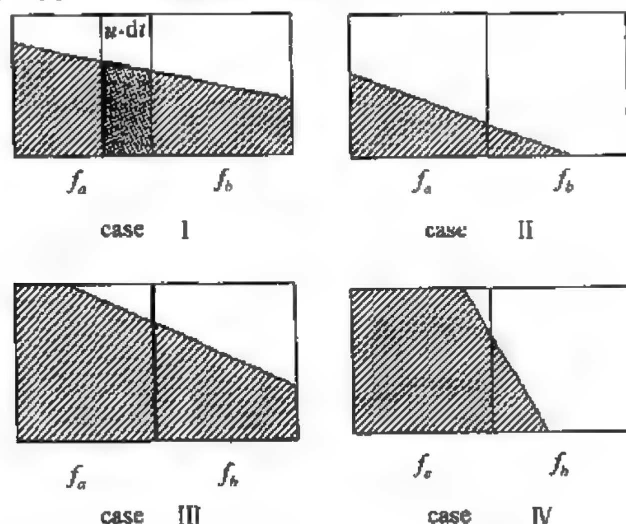


图 15.3 FLAIR 界面重构技术

过两个网格，其下阴影区域是目标流体，由两个网格的流体体积函数来确定这条直线的斜率和位置. 从而计算出网格边界的流量输运. 如第一种情况(case I)，设左边是施主网格，则一个时间步内输运到相邻网格的体积量就是宽度为 $u\delta t$ 斜线阴影区域的面积；如果右边是施主网格，则应取右边网格内靠近网格边界的宽度为 $u\delta t$ 的区域面积.

而第四种情形更为复杂，以如图 15.4 所示的情形为例加以说明. 施主网格(i,j)是半网格，而受主网格$(i+1,j)$是空网格，我们可以用网格(i,j)的另一个方向的两个相邻网格分别按(3)的方法构造界面，计算界面斜率，然后取其平均值作为网格(i,j)内界面的近似斜率，再进一步按类似于(3)的方法构造直线作为此网格内的界面近似，然后求出流过网格边界流入受主网格的流体体积量. 同样可以归结为如图 15.3 所示的 4 种情形. 如果受主网格是空网格则取靠右边的宽度 $u\delta t$ 的区域面积作为流通量；如果受主网格是满网格，则取左边的宽度为 $u\delta t$ 的区域面积作为流通量. 即保证流体靠近满网格一边.

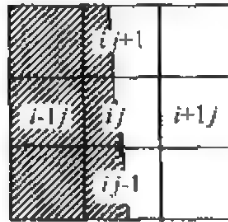


图 15.4 目标格子与其邻格

计算过程采用方向分裂方法，先根据 X 方向的流体速度计算所有 X 方向的数值流通量，对流体体积函数作修改，得到所有网格上的流体体积函数的中间值. 然后以此中间值为初值，对 Y 方向作同样计算，得到下一时刻的流体体积函数场. 如果不采用方向分裂，而是直接同时对 X、Y 方向的流通量进行计算，同时修改流体体积函数，则会产生质量不守恒，我们的实验表明了这一点.

3. Youngs' VOF 界面重构技术

与 FLAIR 方法不同，Youngs 的方法[252]是在单个网格内用直线段近似界面. 先计算该网格内界面的法向 $\vec{n}=(n^x_{i,j},n^y_{i,j})$，

$$
\begin{aligned}
n^x_{i,j} &= (C_{i+1,j+1}+2C_{i+1,j}+C_{i+1,j-1}-C_{i-1,j+1}-2C_{i-1,j}-C_{i-1,j-1})/\delta x,\\
n^y_{i,j} &= (C_{i+1,j+1}+2C_{i,j+1}+C_{i-1,j+1}-C_{i+1,j-1}-2C_{i,j-1}-C_{i-1,j-1})/\delta y.
\end{aligned}
\tag{15.10}
$$

根据法向可以确定运动界面与 X 轴的夹角 β，并将其规格化为 α. 与 FLAIR 方法类似地有 16 种情形，通过简单地对称和翻转可以化为如图 15.5 所示的 4 种情形. 则

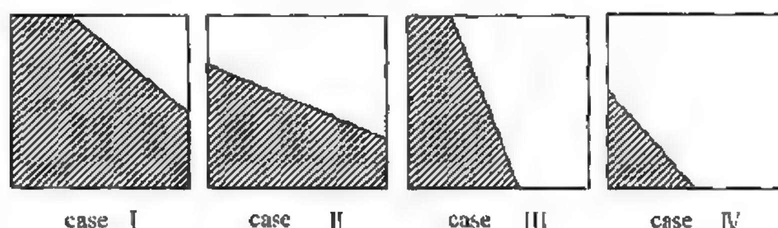


图 15.5　目标格子内运动界面的 4 种典型情况

$$\beta = \arctan\left(\frac{-n^x}{n^y}\right), \alpha = \arctan\left(\frac{\delta x}{\delta y}\tan\beta\right), (\pi/2 \leqslant \alpha \leqslant \pi). \quad (15.11)$$

利用此夹角和网格内体积函数可以确定属于那一种类型,然后计算直线的斜率与位置,构造该网格内的界面,并计算在一个时间步内流过四周边界到相邻网格的流体体积量,以修改本网格和四周相邻网格的流体体积函数值.

4. Ubbink' 界面捕捉方法——CICSAM 方法

以上所介绍的求解 VOF 方程的方法,大都是采用方向分裂(或算子分裂)方法向多维推广的, Ubbink[226] 等提出的 CICSAM(compressive interface capturing scheme for arbitrary meshes)方法通过半隐式处理,使得该方法不用通过算子分裂就可以推广到多维,这对该方法应用到非结构网格中扫清了障碍. CICSAM 方法采用 NVD(normalized variable diagram)的概念,把原 Hirt & Nichols 根据自由面方向决定是使用耗散格式(如:upwind,用来得到光滑的界面)还是色散格式(如:downwind,用来得到锐利的界面)的思想继承下来,并把色散和耗散格式的精度提高,把色散与耗散格式间的切换做得更加光滑.该方法在获得锐利的界面的同时又保证了体积函数的有界性.

流体体积函数的输运方程(15.2)的离散是在交错网格(如图 15.1)上进行的,即除速度定义在网格边界上外,其他变量都定义在网格中心. 采用 Crank-Nicolson 离散,时间达到二阶精度:

$$(C_p^{t+\delta t} - C_p^t)V_p = -\sum_{f=1}^{n}\frac{1}{2}((C_fF_f)^t + (C_fF_f)^{t+\delta t})\delta t, \quad (15.12)$$

p 代表网格(控制体)的中心, f 表示网格的边, n 表示网格的边界数目, V_p 是控制体的体积, F_f 是流过边上向外的通量. 当时间足够小的时候,可近似认为各边上的通量 F_f 不变,网格边界上的流体体积函数 C_f 可以通过两边的施主和受主网格的 C 表示:

$$C_f = (1-\beta_f)C_D + \beta_f C_A, \quad (15.13)$$

其中 β_f 通过 NVD 方法[8]确定. 如果时间步长足够小,可近似认为 $\beta_f^{t+\delta t} = \beta_f^t$,这时,(15.12)可写为

$$C_p^{t+\delta t} = C_p^t - \frac{\delta t}{V_p}\sum_{f=1}^{n} C_f^* F_f,\qquad(15.14)$$

其中

$$C_f^* = (1-\beta_f)\frac{C_D^t + C_D^{t+\delta t}}{2} + \beta_f\frac{C_A^t + C_A^{t+\delta t}}{2}.\qquad(15.15)$$

以下主要说明一下上式中 β_f 的确定,用 NVD 方法求 n 时刻格子边上的 β_f 的步骤:

(1) 利用下式计算归一化变量(normalized variable)$\tilde{C}_D$,记 C_U 为施主网格的上游网格:

$$\tilde{C}_D = \frac{C - C_U}{C_A - C_U}.\qquad(15.16)$$

(2) 计算 CBC(convection boundedness criteria)的上界 $\tilde{C}_{fCBC}$:

$$\tilde{C}_{fCBC} = \begin{cases}\min\left\{\dfrac{\tilde{C}_D}{c}, 1.0\right\}, & 若\ 0 \leqslant \tilde{C}_D \leqslant 1,\\ \tilde{C}_D, & 其他,\end{cases}\qquad(15.17)$$

其中,c 是施主网格的 Courant 数. (15.17)式即 hyper-c 格式的归一化变量. 该格式具有较强的色散性,单独使用格式是不稳定的,但该格式可以获得非常锐利的界面.

(3) 计算 ultimate-quickest 格式的归一化变量 $\tilde{C}_{fUQ}$,

$$\tilde{C}_{fUQ} = \begin{cases}\min\left\{\dfrac{8c\tilde{C}_D + (1-c)(6\tilde{C}_D + 3)}{8}, \tilde{C}_{fCBC}\right\}, & 若\ 0 \leqslant \tilde{C}_D \leqslant 1,\\ \tilde{C}_D, & 其他,\end{cases}\qquad(15.18)$$

该格式具有较强的耗散性,单独使用的时候,会抹平界面,但与其他格式配合使用,可以消除振荡. 该格式取第一种情况时,可以达到 3 阶精度.

(4) 原始的 Hirt & Nichols 的 VOF 在 upwind 和 downwind 之间采用非常剧烈的切换,而不同的切换准则会导致相差很大的结果. 这里采用在 hyper-c 格式和 ultimatte-quickest 格式间一种非常光滑的切换方式. 这种切换也是基于界面与边交角的. 如果界面与边平行,则趋向于采用耗散性的格式来光滑界面. 反之,当界面与边垂直时,则趋向于采用色散性的格式,以获得锐利的界面.

$$\tilde{C}_f' = \gamma_f \tilde{C}_{fCBC} + (1-\gamma_f)\tilde{C}_{fUQ},\qquad(15.19)$$

其中

$$\gamma_f = \min\left\{k_\gamma \frac{\cos(2\theta_f) + 1}{2}, 1\right\},$$

$$\theta_f = \cos^{-1}\left|\frac{(\nabla C)_D \cdot \vec{d}_f}{|(\nabla C)_D| \cdot |\vec{d}_f|}\right|,$$

$\vec{d}_f$ 是连接 Donor 和 Acceptor 中心的矢量，如果网格是矩形，则该矢量与边上的法向同向．$k_\gamma \geqslant 0$ 是一个控制两种格式权值的参数，k_γ 取得越大，则 $\tilde{C}_{fCBC}$ 的权值越大，建议 k_γ 取为 1．

(5) 根据归一化变量确定 β_f，

$$\beta_f = \frac{\tilde{C}_f - \tilde{C}_D}{1 - \tilde{C}_D}. \tag{15.20}$$

通过以上步骤得出的 $C^{t+\delta t}$ 会产生非物理值，或者说，取值不符合有界性条件 $0 \leqslant C \leqslant 1$，这时需要对体积函数进行有界性修正．Hirt&Nichols 直接采用强制性条件使得体积函数分别等于 0 或 1，但这会导致体积函数的不守恒，从而可能影响动量方程，计算出的流场不真实．Ubbink 的 CICSAM 方法采用一种对格子边上的体积通量进行修正的方法，在保持了体积函数有界性的同时，又维持了体积函数的守恒性．但我们的数值试验表明，是否进行有界性修正对矩形网格几乎没有影响(两种方法得到的体积函数的等值线是重合的)．

除了上述重构类的方法以外，还有一些方法直接把 VOF 方程看作一般的间断问题进行求解，也得到了很好的结果．

5．积分平均型 TVD 格式

积分平均型 TVD 格式是把求解函数构造成分片的线性函数，用特征线方法推进时间步，并利用 superbee 限制器对斜率加以限制以使格式保持单调，具有 TVD 性质．例如一维情况

$$\frac{\partial C}{\partial t} + V\frac{\partial C}{\partial x} = 0, \qquad V > 0, \tag{15.21}$$

其步骤如下：

(a) 控制体积 $[x_{i-\frac{1}{2}}, x_{i+\frac{1}{2}}] \times [t_n, t_{n+1}]$，对上述方程积分

$$\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}}\int_{t_n}^{t_{n+1}}\left(\frac{\partial C}{\partial t} + V\frac{\partial C}{\partial x}\right)\mathrm{d}x\mathrm{d}t = 0.$$

定义积分平均

$$\overline{C}_i^n = \frac{1}{\delta x}\int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} C^n(x)\mathrm{d}x, \delta x = x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}},$$

$$\langle V\overline{C}_{i+\frac{1}{2}}^n \rangle = \frac{1}{\delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}} VC_{i+\frac{1}{2}}(t)\mathrm{d}t, \delta t = t_{n+1} - t_n,$$

则时空控制体上的积分可表示为

$$\overline{C}_i^{n+1} = C_i^n - r(\langle V\overline{C}_{i+\frac{1}{2}} \rangle - \langle V\overline{C}_{i-\frac{1}{2}} \rangle), r = \frac{\delta t}{\delta x}.$$

(b) 时间积分平均的离散

这是问题的关键. 利用特征线方法,显然可以得到

$$\langle\bar{C}^n_{i+\frac{1}{2}}\rangle = \frac{1}{\delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}} C(x_{i-\frac{1}{2}}, t)\mathrm{d}t$$

$$= \frac{1}{\delta t}\int_{t_n}^{t_{n+1}} C(x_i + \frac{1}{2}\delta x - V(t-t_n), t_n)\mathrm{d}t, V > 0.$$

如果我们对于上述积分采用简单的梯形公式,并且采用被积函数的一阶 Taylor 展开,则有

$$\langle\bar{C}^n_{i+\frac{1}{2}}\rangle = \frac{1}{\delta t}\left\{\left[\bar{C}^n_i + \left(\frac{1}{2}\delta x - V\delta t\right)\frac{\partial \bar{C}^n_i}{\partial x}\right] + \left[\bar{C}^n_i + \left(\frac{1}{2}\delta x - 0\right)\frac{\partial \bar{C}^n_i}{\partial x}\right]\right\}/2\cdot\delta t$$

$$= \bar{C}^n_i + \frac{1}{2}(\delta x - V\delta t)\frac{\partial \bar{C}^n_i}{\partial x} = \bar{C}^n_i + \frac{1}{2}(1-c)\frac{\partial \bar{C}^n_i}{\partial x}\delta x$$

$$= C^n_i + \frac{1}{2}(1-c)\delta x S^n_i,$$

其中 c 为 Courant 数,S^n_i 是空间控制元上的斜率

$$c = \frac{V\delta t}{\delta x}, \quad S^n_i = \frac{\partial \bar{C}^n_i}{\partial x}.$$

类似地有

$$\langle\bar{C}^n_{i-\frac{1}{2}}\rangle = \bar{C}^n_{i-1} + \frac{1}{2}(1-c)\Delta\bar{C}^n_{i-1} = \bar{C}^n_{i-1} + \frac{1}{2}(1-c)\delta x S^n_{i-1}.$$

(c) 合成积分平均格式

$$C^{n+1}_i = \bar{C}^n_i - c(\bar{C}^n_i - \bar{C}^n_{i-1}) + 0.5c\delta x(c-1)(S^n_i - S^n_{i-1}), \quad (15.22)$$

上述计算利用了 $V>0$,对一般的速度 V 可以将格式写为

$$\begin{aligned}\bar{C}^{n+1}_i = \bar{C}^n_i &- r\max(0,V)(\bar{C}^n_i - \bar{C}^n_{i-1}) + 0.5r\delta_x\max(0,V)(c-1)(S^n_i - S^n_{i-1})\\ &- r\min(0,V)(\bar{C}^n_{i+1} - \bar{C}^n_i) + 0.5r\delta_x\min(0,V)(c+1)(S^n_{i+1} - S^n_i).\end{aligned} \quad (15.23)$$

如果取斜率 S^n_i 为:

$$S^{LW,n}_i = (\bar{C}^n_{i+1} - \bar{C}^n_i)/\delta x, \quad (15.24a)$$

就得到 Lax-Wendroff 格式,但是该格式不是保单调的,在间断处会产生振荡,因此我们对斜率加以限制,取

$$S^n_i = \phi(\theta^n_i)S^{LW,n}_i, \quad (15.24b)$$

其中

$$\phi(\theta^n_i) = \max(0, \min(1.0, 2\theta^n_i), \min(2.0, \theta^n_i)) \quad (15.24c)$$

是 superbee 限制器. 这样得到的格式是 TVD 的. 对于二维和三维情形,我们可以采用分数步法,进行计算. 前半个时间步计算

$$\frac{1}{2}\frac{\partial C}{\partial t} + u\frac{\partial C}{\partial x} = 0,$$

得到中间值 $C^{n+1/2}$,再以此为初值在后半个时间步计算

$$\frac{1}{2}\frac{\partial C}{\partial t} + v\frac{\partial C}{\partial y} = 0,$$

得到 $n+1$ 时刻的值 C^{n+1}. 这样构造的格式精度和分辨率都较高，我们还可以构造分片的二次或高次多项式近似(类似于 PPM 的方式)，时间步推进还可以利用 Taylor 展开代替特征线方法，斜率的构造也可以采用其他方法，如 ENO 的选择模板的方法. 因而 20 世纪 80 年代发展并得到广泛应用的高分辨率格式及它们的相互结合，还是有很好的应用前景，因而也很有继续研究的价值. 我们利用上述的 superbee TVD 格式，对旋转流和剪切流的运动界面问题，进行了计算，得到了很好的效果.

6. FCT-VOF 方法

FCT-VOF 方法基于 FCT (flux-corrected transport algorithms)的思想求解流体体积函数方程的[19,252]. 首先对一维的情形(15.21)式，采用数值流通量守恒形式:

$$C_i^{n+1} = C_i^n - r(F_{i+1/2} - F_{i-1/2}),\ r = \frac{\delta t}{\delta x}. \tag{15.25}$$

关键是数值流通量 $F_{i+1/2}$的确定，如果选择低阶流通量(如 Lax 格式、upwind 格式)，则能保持单调性，无振荡，但耗散性很强；而如果选择高阶流通量(如 Lax-Wendroff 格式)则分辨率高，但色散性强，在间断处产生振荡. FCT 方法的策略是采用两者结合，先利用低阶通量 F^L 计算一个中间值 C^*，再利用高阶流体通量 F^H 进行修正，计算 C^{n+1}. 现在在施主——受主的观点下，取低阶通量 F^L 为 upwind 格式，而取 F^H 为 downwind 格式代替高阶格式. 具体地讲可以分为以下几个步骤:

(1) 计算低阶流通量

$$F_{i+1/2}^L = \begin{cases} u_{i+1/2}F_i, & u_{i+1/2} \geq 0, \\ u_{i+1/2}F_{i+1}, & u_{i+1/2} < 0, \end{cases} \tag{15.26a}$$

并依此计算中间值

$$C^* = C_i^n - \frac{\delta t}{\delta x}(F_{i+1/2}^L - F_{i-1/2}^L).$$

(2) 计算高阶流通量

$$F_{i+1/2}^H = \begin{cases} u_{i+1/2}F_{i+1}, & u_{i+1/2} \geq 0, \\ u_{i+1/2}F_i, & u_{i+1/2} < 0, \end{cases} \tag{15.26b}$$

并构造反扩散流量 $AF_{i+1/2} = F_{i+1/2}^H - F_{i+1/2}^L$.

(3) 对反扩散流量加以限制，$AC_{i+1/2} = q_{i+1/2}AF_{i+1/2}$，$q_{i+1/2}$的求法请参看文献[255]，并依此对中间值进行修正

$$C_i^{n+1} = C_i^* - \frac{\delta t}{\delta x}(AC_{i+1/2} - AC_{i-1/2}). \tag{15.27}$$

对二维或三维的情形,同样采用方向分裂算法. 对 X 方向和对 Y 方向的扫描应当顺序交替进行,以避免引入系统误差. 但方向分裂带来了一个问题,就是对 X 方向计算后,会产生某些网格内的流体体积分数大于 1,这给下一步计算带来困难,因为新的流通量的计算要用到这些值. 所以 Rudman[7-8]采用这样的手段:设 $\delta V_{i,j}$表示网格(i,j)的体积,每一时间步开始 $\delta V_{i,j} = \delta x\delta y$,对每个方向计算网格内流体体积的量,而不是计算体积分数,并利用 Lagrange 的观点计算半时间步后的网格体积,再相除得到体积分数 $C_{i,j}^{n+1}$,即:

$$\begin{aligned}
&\tilde{C}_{i,j} = C_{i,j}^n \delta V_{i,j}^n - (F_{i+1/2}^x - F_{i-1/2}^x);\\
&\delta V_{i,j}^{n+1/2} = \delta V_{i,j}^n - \delta t\delta y(u_{i+1/2,j} - u_{i-1/2,j});\\
&C_{i,j}^{n+1/2} = \tilde{C}_{i,j}/\delta V_{i,j}^{n+1/2}.
\end{aligned} \tag{15.28}$$

Y 方向的计算也作类似处理. 其实质是在$\nabla\cdot\vec{u}=0$ 的基础上分步求解方程流体体积函数方程的分裂形式

$$\begin{cases}
\dfrac{\partial C}{\partial t} + \dfrac{\partial(uC)}{\partial x} = C\dfrac{\partial u}{\partial x},\\[2mm]
\dfrac{\partial C}{\partial t} + \dfrac{\partial(vC)}{\partial y} = C\dfrac{\partial v}{\partial y}.
\end{cases} \tag{15.29}$$

将上述格式 Taylor 展开不难看到这一点.

15.3 数值算例[148,188,189]

在这一节中我们就几个典型的流场——常数流场、旋转流场、剪切流场对流体体积方程(15.1)的输运做了数值模拟,比较各种方法的优劣. 以便在利用 VOF 方法进行体积追踪来求解活动界面问题时,有所取舍.

1. 常数速度场(平移)

首先对最简单的速度场——常数速度场$(u,v)=(1,0)$或$(u,v)=(2,-1)$,求解二维体积输运方程(15.2)进行了计算. 我们取初值如图 15.6 所示的同心方框,在两方框之间的区域赋值 1.0,在其他区域赋值 0.0,整个计算区域为$[0,2]\times[0,2]$,网格尺寸取为 200×200,时间步长取为 $\delta t=0.001$.

图 15.9 给出了速度场$(u,v)=(2,-1)$,时间 $t=0.5$ 时的上述各种方法的计算结果. 图中显示的是从 0.0625 到 0.9375 的 15 条等值线,可以看出 FCT-VOF、积分平均格式、Youngs' VOF 方法都能给出较好的结果. FCT-VOF 的效果更好一些,在角点处能保持尖锐,分辨率很高,而 Youngs' VOF 在

角点处有所光滑化,这是由求法线的过程引起的,但等值线 0.0625 与 0.9375 之间的距离能保持很小(网格分辨率的量级上),这一点似乎比积分平均格式较优秀. 正如 Rudman 的计算结果表明的,我们把方框改为圆周形进行计算,得到的结果,Youngs' VOF 就比 FCT-VOF 要好一些.

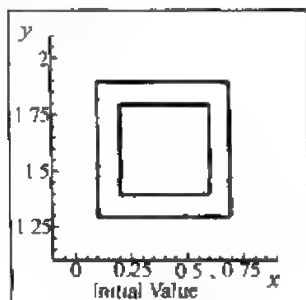


图 15.6

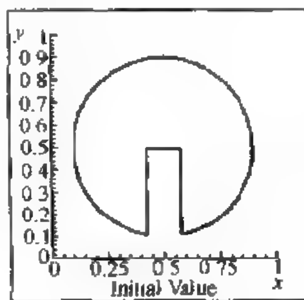


图 15.7

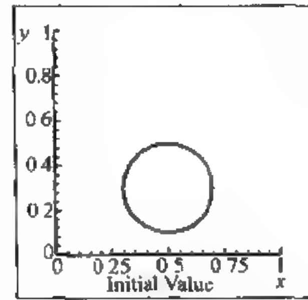


图 15.8

2. 旋转流场(Zalesak 问题)

二维旋转流,速度场为

$$u(x,y) = -\pi\left(y - \frac{1}{2}\right), \quad v(x,y) = \pi\left(x - \frac{1}{2}\right). \qquad (15.30)$$

这个速度场不倾向于任意一个方向,是检验求解方程(15.2)的算法的很好的算例. 我们在计算区域$[0,1]\times[0,1]$中,取初值为如图 15.7 所示的有缺口的圆周,这就是著名的 Zalesak 问题,如 Vincent 等人所说[233],要在尖锐的角点处保持高分辨率是困难的. 网格取为 200×200,时间步长 $\delta t = 0.001$.

分别利用上述的几种方法:施主——受主方法、FLAIR 界面重构方法、Youngs 的界面重构方法、积分平均格式、FCF——VOF 方法、以及 CICSAM 方法计算了方程(15.2),初值在速度场(15.30)下旋转 $\pi/4$、$\pi/2$、$3\pi/2$、2π 的图像如图 15.10 所示. 可以看出,Hirt 和 Nichols 的方法相当粗糙,FLAIR-VOF、Youngs-VOF、积分平均格式、FCT-VOF、CICSAM 方法都能得到较好的结果. 而以 Youngs、积分平均格式及 CICSAM 方法的结果最好.

3. 剪切流场

平移和旋转流场都不会使运动界面的形状发生变化,而在一个真实的流体问题中,会包含如拉伸、剪切、碰撞、破碎等复杂的物理现象. 为了考察算法对各种现实流场的模拟效果,我们还计算了剪切流场下的二维体积输运方程(15.2),其速度场为:

$$\begin{aligned} u(x,y) &= \pi\cos(\pi(x - x_0))\sin(\pi(y - y_0)), \\ v(x,y) &= -\pi\sin(\pi(x - x_0))\cos(\pi(y - y_0)). \end{aligned} \qquad (15.31)$$

考察算法对剪切流的模拟效果十分重要,这不仅因为剪切流如平移和旋转一样是流体中常见的现象,而且剪切流的模拟有一定的代表性.

我们取计算区域为[0,1]×[0,1],初始界面为圆心在(0.5,0.3),半径0.2的圆周(如图 15.8). 对上述的除 Hirt-VOF 之外的 5 种格式做了计算试验,分别计算到时间 $t=1.0$ 和 $t=2.0$ 后,再以此结果为初值,将速度反号,分别反剪切 1.0 秒和 2.0 秒. 其结果在图 15.11 中给出. 结果表明 Youngs、积分平均格式的结果最好.

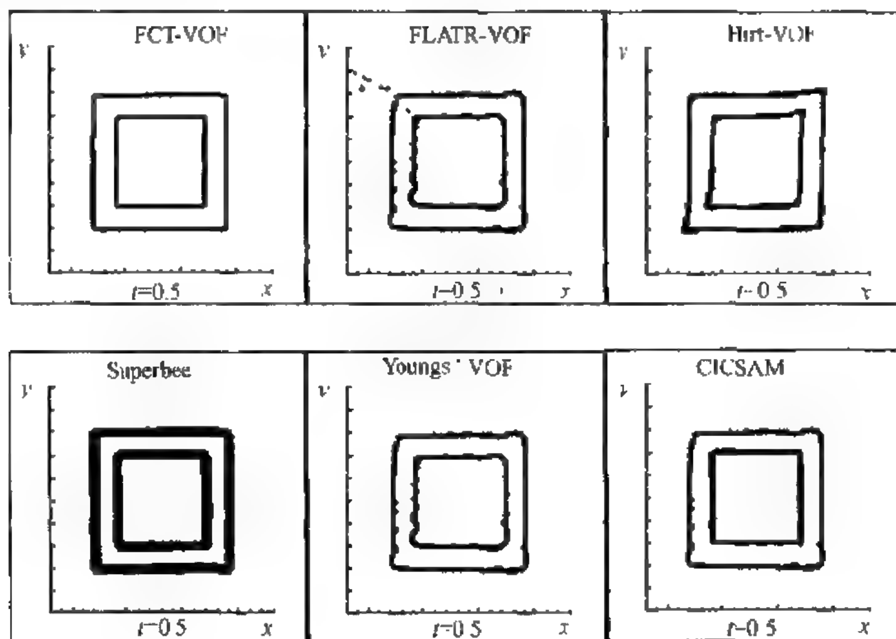
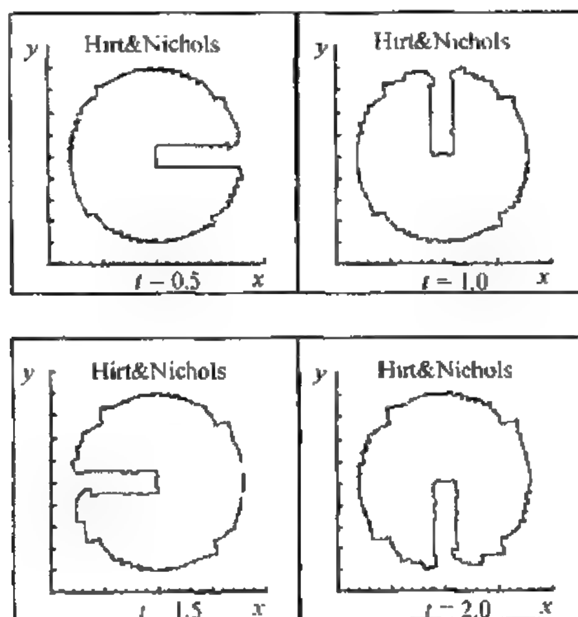
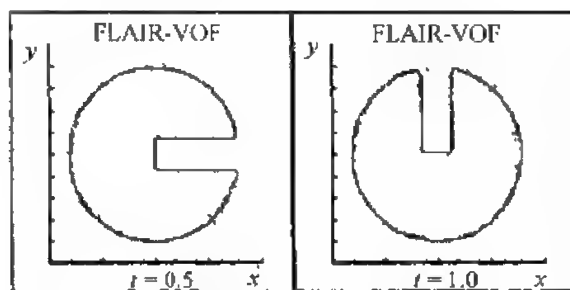
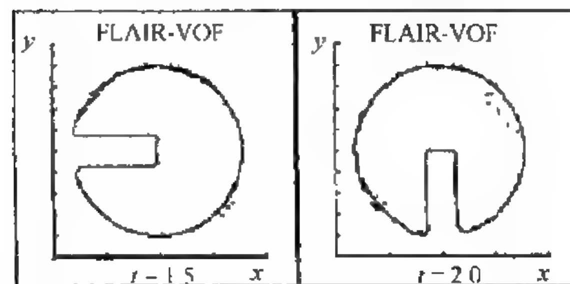
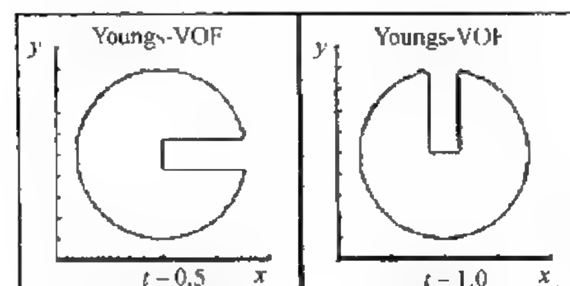


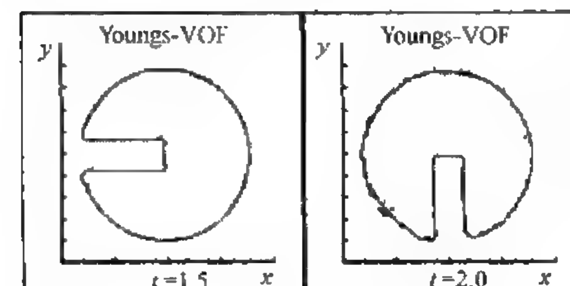
图 15.9

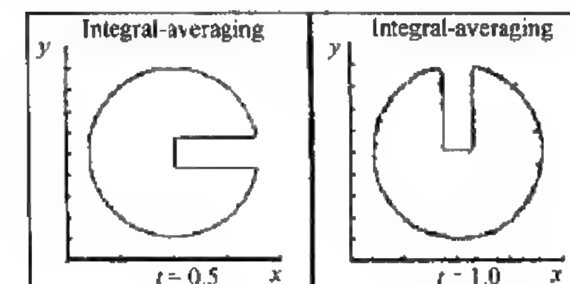



FLAIR-VOF
y
t = 0.5
x
FLAIR-VOF
y
t = 1.0
x


FLAIR-VOF
y
t = 1.5
x
FLAIR-VOF
y
t = 2.0
x


Youngs-VOF
y
t = 0.5
x
Youngs-VOF
y
t = 1.0
x


Youngs-VOF
y
t = 1.5
x
Youngs-VOF
y
t = 2.0
x


Integral-averaging
y
t = 0.5
x
Integral-averaging
y
t = 1.0
x

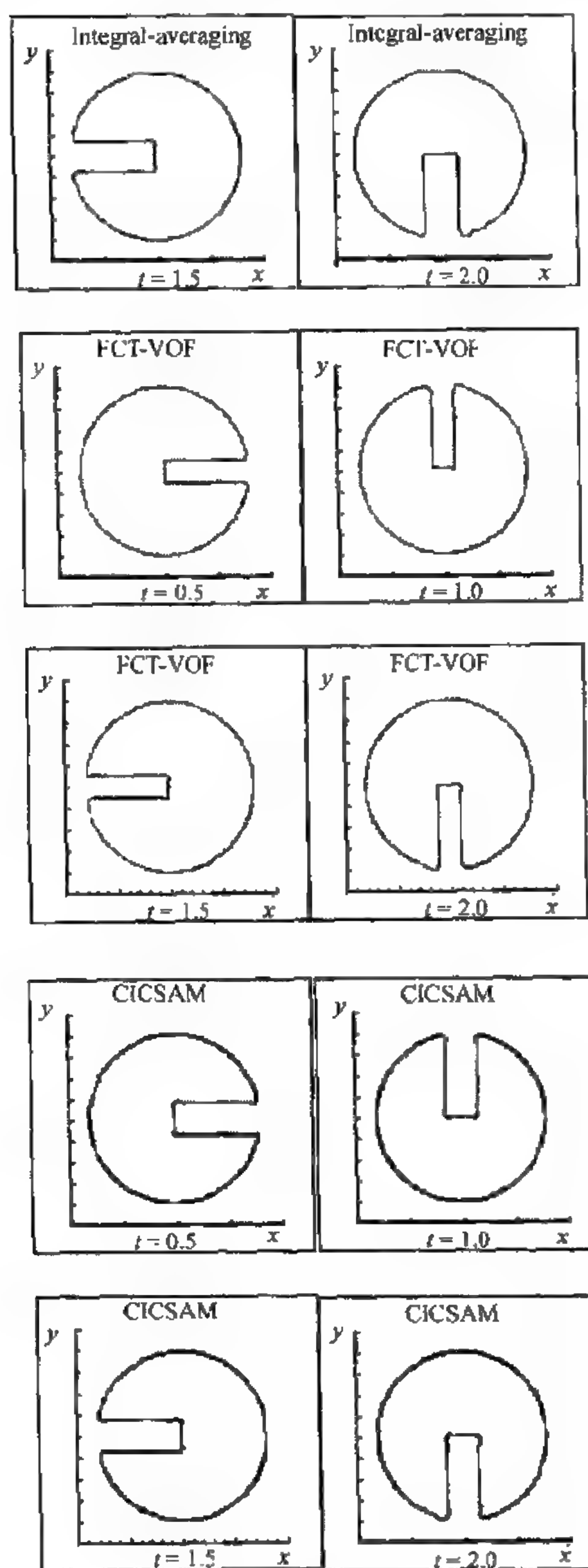
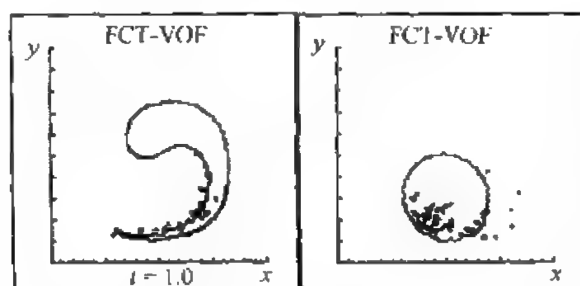
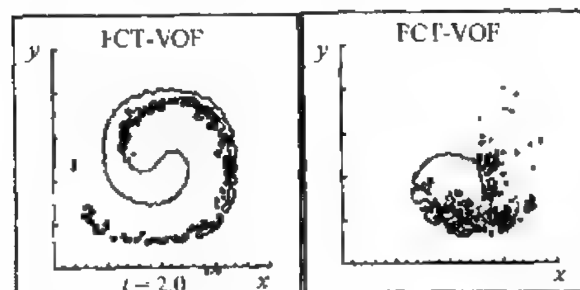
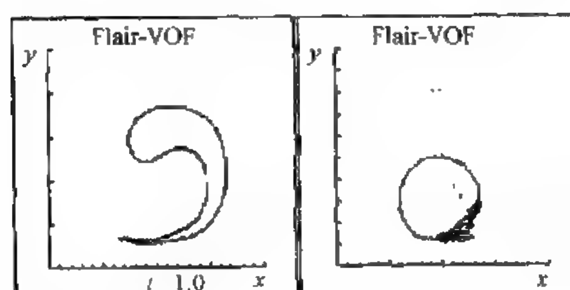
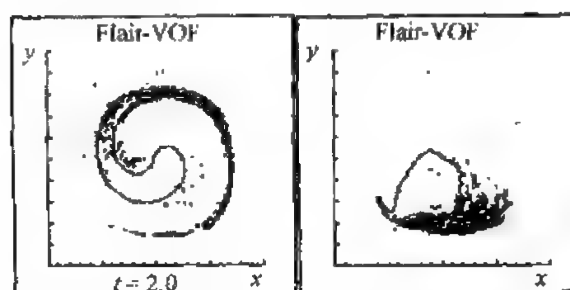

Integral-averaging
y
t=1.5
x
Integral-averaging
y
t=2.0
x
FCT-VOF
y
t=0.5
x
FCT-VOF
y
t=1.0
x
FCT-VOF
y
t=1.5
x
FCT-VOF
y
t=2.0
x
CICSAM
y
t=0.5
x
CICSAM
y
t=1.0
x
CICSAM
y
t=1.5
x
CICSAM
y
t=2.0
x

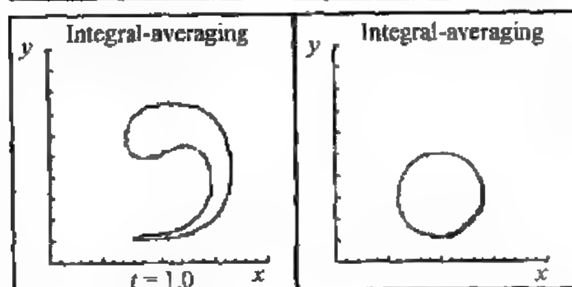
图 15.10

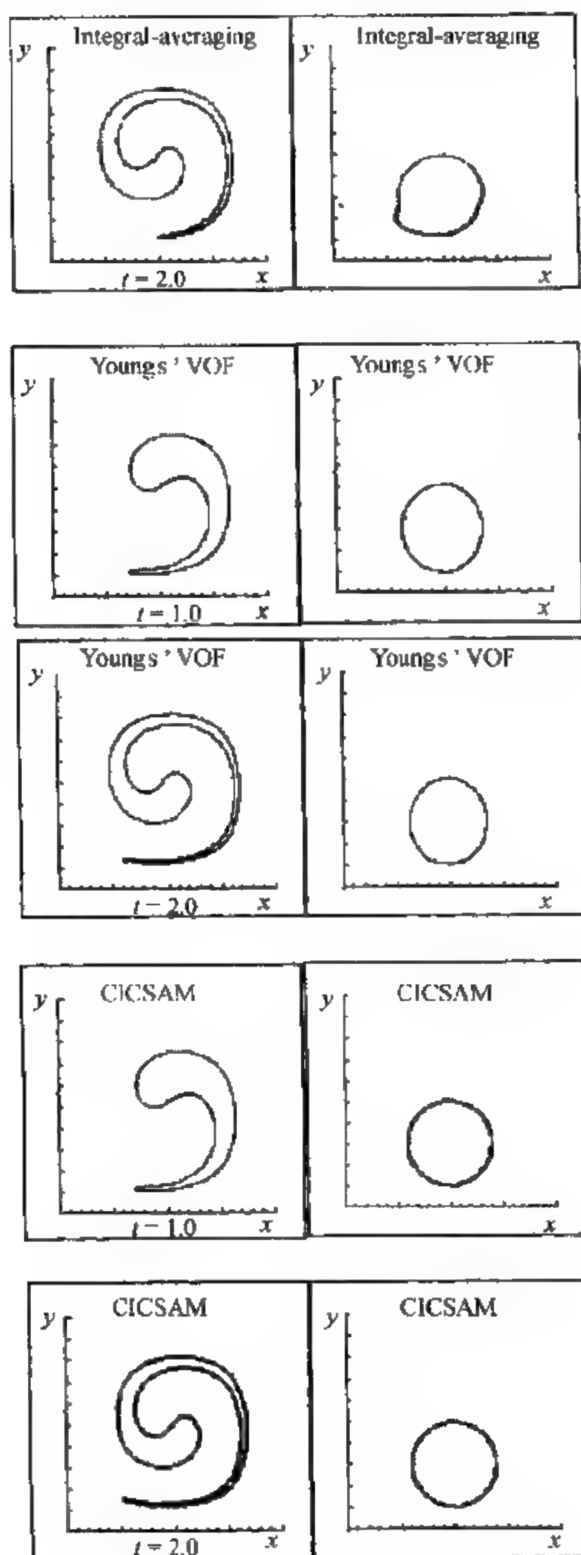

FCT-VOF
FCT-VOF
y
y
t = 1.0
x
x


FCT-VOF
FCT-VOF
y
y
t = 2.0
x
x


Flair-VOF
Flair-VOF
y
y
t = 1.0
x
x


Flair-VOF
Flair-VOF
y
y
t = 2.0
x
x


Integral-averaging
Integral-averaging
y
y
t = 1.0
x
x



Integral-averaging
y
t = 2.0
x
Integral-averaging
y
x
Youngs' VOF
y
t = 1.0
x
Youngs' VOF
y
x
Youngs' VOF
y
t = 2.0
x
Youngs' VOF
y
x
CICSAM
y
t = 1.0
x
CICSAM
y
x
CICSAM
y
t = 2.0
x
CICSAM
y
x

图 15.11

15.4 界面追踪方法的应用前景

广义的界面追踪方法包括所有对激波(shock)、物质界面(interface)或自由面(free surface)的追踪. 激波、界面或自由面都是间断的,本应该当做间断处理,而不应该像激波捕捉(shock capturing)那样抹杀了间断与连续的区别,降低了分辨率. 因此,波前追踪才符合人们的一般思维. 带有间断现象的问题,关键就在间断处的数值逼近,而界面追踪正是抓住了问题的关键,将激波、界面或自由面当做活动的内部边界处理. 首先求出活动边界的位置等几何特性,然后进行物理量的求解,这样可以在活动边界处对控制方程采用特殊处理,以提高解的分辨率和精度,得到更加逼真的物理图像. 波前追踪方法把主要精力放在活动界面、自由面、激波等关键地方,其他区域用一般的格式求解,而不是对整个求解区域统一对待. 像TVD、Roe等方法,在光滑区域可达到三阶、四阶,在关键的间断区域却只能是一阶,这是不合理的. 波前追踪方法之所以越来越受到人们的青睐,就是因为它抓住了问题的主要矛盾. 目前,波前追踪方法已经有了极大发展,出现了各种各样的追踪方法,关于波前追踪方法及其算例的文章浩若烟云.

由于间断、活动边界、物质界面在日常生活、生产实践以及科学计算中十分常见. 例如凝固(solidification)与融化(melting),蒸发(evaporation)与凝结(condensation),多孔介质流和渗流(flow through porous media or seapage),声波、水波的传播(wave propagation),侵蚀(intrusion)、沉积(sedimentation)与渗透(infiltration),溢洪道(spillway)与过水闸门(sluice gate),润滑(lubrication),铸造(casting)与熔焊(welting),采油,燃烧(combustion)和爆炸(detonation),化学反应及扩散过程(chemical and diffusion)等. 对这些现象的模拟也就十分必要. 但是对这些问题的研究几乎还停留在一维、二维阶段,三维的文章还很少. 因而特别突出这种front或者interface的精细的数值模拟方法,例如VOF和FEM/FVM相结合的方法、level set方法、波叠加方法和两层网格方法是处理这类问题的极有成效和发展前途的方法,且易于推广到三维,将会得到日益广泛的应用.

第十六章　等值面(level set)函数方法

在第二篇里,我们提到美国 Los Alamosd 的 Harlow 等人创立的 MAC 和 PIC 等格子类方法,采用格子内安置多个 Marker 或者 Particle 点,同样可以实现对于自由面和运动界面的刻画和追踪,而且在 20 世纪 60 年代,凭借 Los Alamos 的得天独厚的硬件条件大出风头,展现了非凡的数值模拟效果. 但是,一般地实现一个复杂的自由面的数值模拟,需要数目庞大的"标志点"或者"质点"数,这对于一般的人而言,实在不容易,即使在今天也极其艰巨和工程浩大. 当然今天这种标志点的思想仍然十分有意义,所以这些方法仍在应用和发展,同时在运动界面追踪的数值研究中,局部地采用也不失为一种重要的方案.

与格子类方法相比,VOF 方法中,每个网格只要保存一个流体体积比函数值,从而大大降低了存储量. 并且通过巧妙的界面重构,可以给出自由面的更精细的描述. 但是,流体体积函数是离散量,要比较准确的求解也相当困难,而且一般要求显式地构造出运动界面.

另一种较理想的做法是利用所谓的等值面函数 (level set function) $\varphi(\bar{x},t)$ 代替 VOF 方法中的流体体积函数 C($\bar{x}$是空间变量,t 表示时间). 让 φ 以适当的速度移动,使其零等值面就是物质界面. 在任意时刻,只要知道 φ,然后求出其零等值面,就知道了此时的活动界面. 等值面函数法克服了一般波前追踪方法必须构造出具体的波前面,而难以处理波前面的拓扑结构发生变化(如合并、交叉、破碎等)情形的弱点. 不需要显式地追踪运动界面,从而可以较容易的处理复杂的物质界面及其拓扑结构发生变化的情形.

综观当前运动界面数值模拟问题的文献,如果说 20 世纪 60 年代是 VOF 方法的主流时期,90 年代似乎可以说是 level set 方法的主流时期. 读者可以关注近期的国内外文献,也就不难了然.

16.1　level set 方法概述

欲求解的物理区域为 $\Omega=\Omega_1\cup\Gamma\cup\Omega_2$,子区域 Ω_1 中是 A 物质,Ω_2 中是 B 物质. Ω_1、Ω_2 的界面 $\Gamma(t)$(两种物质的分界面)又受物理场的制约而随时间运动. A、B 两种物质是不相溶的,或状态不同.

我们所特别关心的是要把握这种运动界面的变化. 即在区域 Ω 中,两种介质的运动界面变化情况,以及介质的温度、速度等物理量的随时间的变化. 尤其是物质界面的运动情况,如在指定时刻的位置、运动速度及其附近的介质

的状态.

level set 方法把随时间运动的物质界面看做某个函数 $\varphi(\vec{x},t)$ 的零等值面，$\varphi(\vec{x},t)$ 满足一定的方程. 在每个时刻 t，我们只要求出函数 $\varphi(\vec{x},t)$ 的值，就可以知道其等值面的位置，也就是运动界面的位置，然后求解整个区域 Ω 中我们关心的介质的物理量(参见 J. A. Sethian 的专著[193,194]，或者刘儒勋和王志峰的专著[148]).

1. level set 函数和 level set 方程

构造函数 $\varphi(\vec{x},t)$，使得在任意时刻，运动界面 $\Gamma(t)$ 恰是 $\varphi(\vec{x},t)$ 的零等值面，即

$$\Gamma(t)=\{\vec{x}\in\Omega:\varphi(\vec{x},t)=0\},\tag{16.1}$$

φ 的初值应满足在 $\Gamma(0)$ 附近为法向单调、在 $\Gamma(t)$ 上为零. 一般可取 $\varphi(\vec{x},0)$ 为 $\vec{x}$ 点到界面 $\Gamma(0)$ 的符号距离

$$\varphi(\vec{x},0)=\begin{cases}d(\vec{x},\Gamma(0)), & \vec{x}\in\Omega_1,\\0, & \vec{x}\in\Gamma(0),\\-d(\vec{x},\Gamma(0)), & \vec{x}\in\Omega_2,\end{cases}\tag{16.2}$$

$d(\vec{x},\Gamma(0))$ 表示 $\vec{x}$ 到 $\Gamma(0)$ 的距离. 等值面函数法的思想就是 φ 以恰当的速度移动，或者说等值面以恰当的速度移动. 在任意时刻，只要求出 φ 的值，就可以确定活动界面的位置，再去求解主场物理量的控制方程. 这样就避免了显式地追踪活动界面(即物质界面)，提高了我们追踪复杂界面的能力.

为了保证在任意时刻，函数 φ 的零等值面就是活动界面，φ 要满足一定的控制方程. 在任意时刻 t，对于活动界面 $\Gamma(t)$ 上的任意点 $\vec{x}$，$\varphi(\vec{x},t)=0$，从而有

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial\varphi}{\partial t}+\vec{V}\cdot\nabla\varphi=0.\tag{16.3}$$

对于具体问题方程(16.3)有具体的形式. 在自由面追踪或二相流问题中，主场物理量控制方程一般是某种形式的 N-S 方程，则方程(16.3)就是

$$\varphi_t+u\varphi_x+v\varphi_y=0,\tag{16.4}$$

其中，$\vec{V}=(u,v)$ 是流体速度. 在形式上与前一节的 VOF 方程相同.

从数学观点来看，这相当于在 n 维的流场 $\Omega\subset R^2$ 中，嵌入了一个 $n-1$ 维的曲面 $\varphi(\vec{x},t)$. 数学上曲面的曲率函数 $k=\nabla\cdot\vec{n}$ 有其特殊的意义. 物理上，如果它是某种介质面或者是运动的界面，它的曲率函数既具有其运动的方向意义，同时它对附近流场的效应也是不能忽视的. 对于后者，我们在许多运动界面的论文中可以看到，运动界面问题的主要物理场的数学模型. 现在常常考虑所谓的耦合形式，即将这个曲面的曲率效应作为一种应力附加到动量方

程的应力项上. 例如,一种比较简单的模型是(参见专著[148])

$$
\begin{aligned}
&\nabla \cdot V = 0 \\
&\frac{\partial \rho V}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho VV - \tau) = -\rho g + f\sigma
\end{aligned}
\tag{16.5}
$$

level set 函数的单位外法向,及运动界面在法向上的运动速度分别为

$$
\begin{aligned}
&\vec{n} = \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|}, \\
&F = V_n = \frac{\mathrm{d}\vec{x}}{\mathrm{d}t} \cdot \vec{n} = \frac{\mathrm{d}\vec{x}}{\mathrm{d}t} \cdot \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|} = \vec{V} \cdot \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|},
\end{aligned}
\tag{16.6}
$$

把(16.6)代入(16.3),得到 φ 的控制方程为

$$
\varphi_t + F|\nabla \varphi| = 0, \qquad x \in \Omega, \tag{16.7}
$$

这个方程称为 level set 函数所满足的又一种 level set 方程. 因而在不同的具体问题,或者学者根据不同的要求和爱好,完全可以给出另外的 level set 函数的控制方程形式. 特别地,如果采用了适用不同的实际问题的耦合型主场数学模型,常常提出别出心裁的 level set 方程形式. 但是,level set 函数 φ 的初值 $\varphi(x,0)$则一般由式(16.2)给出.

2. 重新初值化[35,3,4,72]

为了求解方便,保持 $\varphi(\vec{x},t)$始终是$\vec{x}$点到界面 $\Gamma(t)$的符号距离是重要的,即要求 $\varphi(\vec{x},t)$在任意时刻 t,满足

$$
\varphi(\vec{x},t) = \begin{cases} d(\vec{x},\Gamma(t)), & \vec{x} \in \Omega_1(t), \\ 0, & \vec{x} \in \Gamma(t), \\ -d(\vec{x},\Gamma(t)), & \vec{x} \in \Omega_2(t). \end{cases} \tag{16.8}
$$

由于物质界面随时间运动,我们用 $\Omega_1(t)$,$\Omega_2(t)$分别表示两种介质在时刻 t 的分布区域. 根据我们对 $\varphi(\vec{x},t)$的初值的设定,初值是满足(16.8)式的. 但是,一般来讲由于数值方法的内在效应,即使进行了几个时间步求解后,$\varphi(\vec{x},t)$将不再是满足(16.8)式定义的符号距离了. 为了保持它的这一良好性质,我们采用一个所谓重新初始化(Re-initialization)的手段,也就是改造 $\varphi(\vec{x},t)$,使其重新成为$\vec{x}$点到界面 $\Gamma(t)$的符号距离.

设在时刻 t,我们已经求得 level set 函数是 φ_0,要重新构造函数 $\varphi(\vec{x},t)$满足两个条件:

(1) $\varphi(\vec{x},t)$满足(16.8),即是符号距离函数;

(2) $\varphi(\vec{x},t)$与 φ_0 有类似的零等值面,即满足(16.1).

要满足这两个条件,我们可以通过求解初值问题

$$\begin{cases}\varphi_\tau = \mathrm{sign}(\varphi_0)(1 - |\nabla \varphi|), \\ \varphi(x, 0) = \varphi_0\end{cases} \tag{16.9}$$

的稳定解来实现. 其稳定解 $\varphi(\bar{x}, t)$ 将是满足(16.8)的符号距离函数,而且由(16.9)式容易看出,$\varphi(\bar{x}, t)$ 与 φ_0 有相同的零等值面. 因为在 φ_0 的零等值面上,$\varphi_t = 0$ 且 $\varphi(x, 0) = 0$,所以可以保持为零等值面. 为了方便求解,我们将符号函数 $\mathrm{sign}(\varphi_0)$ 光滑化为

$$\mathrm{sign}_\varepsilon(\varphi_0) = \frac{\varphi_0}{\sqrt{\varphi_0^2 + \varepsilon^2}}. \tag{16.10}$$

3. level set 方法的一般步骤

用 level set 方法求解二相(或多相)介质问题的一般步骤是:

(1) 初始化.

初始化所要求的物理量及函数 $\varphi(\bar{x}, t)$(由(16.2)式给出). 下面假设 t_n 时刻的物理量值和 level set 函数 $\varphi(\bar{x}, t_n)$ 已知.

(2) 求解 level set 方程.

求解方程(16.3)的具体形式,得到下一时刻的 level set 函数 $\varphi(\bar{x}, t_{n+1})$ 在整个求解区域中的值. 此时的新的运动界面 $\Gamma(t_{n+1})$ 就是 $\varphi(\bar{x}, t_{n+1})$ 的零等值面,即 $\Gamma(t_{n+1}) = \{\bar{x} \in \Omega : \varphi(\bar{x}, t_{n+1}) = 0\}$,但此时的 $\varphi(\bar{x}, t_{n+1})$ 已经不再是符号距离函数了.

(3) 重新初始化.

将 $\varphi(\bar{x}, t_{n+1})$ 代替(16.9)中的 φ_0,迭代求解方程(16.9)至稳定解,仍记为 $\varphi(\bar{x}, t_{n+1})$.

(4) 求解物理量的控制方程.

结合 $\varphi(\bar{x}, t_{n+1})$ 的值,求解主场的物理量的控制方程,得到 t_{n+1} 时刻的物理量的值. 在 $\varphi(\bar{x}, t_{n+1})$ 变号的地方(即界面)进行特殊处理.

(5) 重复(2)~(4),进入下一时间步的计算.

这只是用 level set 方法求解的大体框架,具体问题,还要作适当调整. 每一步的求解,具体问题具体解决.

下面几节,我们将分别对上述几个步骤的求解作更详尽的讨论.

16.2　求解 level set 方程

在界面追踪问题中,求解运动界面是至关重要的,面活动界面的位置、几何形状等特性对于求解物理量的控制方程十分关键,甚至在很多时候,活动界面正是我们关心的问题. 由于在时刻 t,活动界面 $\Gamma(t)$ 就是 $\varphi(\bar{x}, t)$ 的零等值

面，从而 level set 方程求解的准确程度就是十分关键的问题.

前面我们讲过，对于不同的具体问题，level set 方程的形式不同，求解方法也就不同，下面分别对方程(16.4)和(16.7)的求解作较为详细的讨论. 其他形式可以作类似处理.

1. 输运方程

对方程(16.4)，我们采用三阶 ENO 格式或五阶 WENO 格式离散空间导数 φ_x, φ_y(以二维情形为例)，用 TVD-Runge-Kutta 格式离散时间导数 φ_t.

利用 ENO 或 WENO 格式，可以构造出左侧和右侧离散导数值分别为 φ_x^-, φ_x^+. φ_x^-, φ_x^+ 分别是由以左侧和右侧网格为基准网格进行模板选择而构造出来的插值多项式，然后求导得到的空间导数值. 然后，在某个网格内，如果 $u>0$，则用 φ_x^- 来作为 φ_x 的离散，否则用 φ_x^+. $v\varphi_y$ 同样处理.

时间离散采用 TVD-Runge-Kutta 方法，这里采用二阶、三阶 Runge-Kutta 方法. 通过上述空间导数离散将方程化为常微分方程

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t}=L(\varphi), \tag{16.11}$$

其中，$L(\varphi)$是空间导数项的离散算子. 二阶时间 TVD-Runge-Kutta 方法分为两步：

$$\begin{cases}\varphi^{(1)}=\varphi^{(0)}+\Delta tL(\varphi^{(0)}),\\ \varphi^{(2)}=\dfrac{1}{2}\varphi^{(0)}+\dfrac{1}{2}(\varphi^{(1)}+\Delta tL(\varphi^{(1)})).\end{cases}$$

三阶的 TVD-Runge-Kutta 法分为三步：

$$\begin{cases}\varphi^{(1)}=\varphi^{(0)}+\Delta tL(\varphi^{(0)}),\\ \varphi^{(2)}=\dfrac{3}{4}\varphi^{(0)}+\dfrac{1}{4}\varphi^{(1)}+\dfrac{1}{4}\Delta tL(\varphi^{(1)}),\\ \varphi^{(3)}=\dfrac{1}{3}\varphi^{(0)}+\dfrac{2}{3}\varphi^{(2)}+\dfrac{2}{3}\Delta tL(\varphi^{(2)}).\end{cases} \tag{16.12}$$

2. Hamilton-Jacobi 方程

对方程(16.7)，F 一般是$\nabla\varphi$ 的函数，于是方程(16.7)变成为 Hamilton-Jacobi 型方程. 即可写为

$$\varphi_t+H(\nabla\varphi)=0. \tag{16.13}$$

1988 年 Osher 和 Sethian[169]给出了一些详细的解法.

(1) 一维问题

令 $u=\varphi_x$，然后对方程(16.13)求 x 的微分

$$u_t + [H(u)]_x = 0,$$

这是守恒律方程. 它的解可以写为如下形式

$$u_j^{n+1} = u_j^n - \frac{\Delta t}{\Delta x}(f_{j+1/2}^n - f_{j-1/2}^n), \tag{16.14}$$

其中, $f_{j+1/2}^n = f(u_{j-p+1}, u_{j-p+2}, \cdots, u_{j+q+1})$. 由于 $u = \varphi_x$, 我们有

$$\varphi_{j+1/2}^n = \sum_{v=-\infty}^{j} u_v^n \Delta x.$$

对(16.14)式从 $-\infty$ 到 j 求和, 有

$$\varphi_{j+1/2}^{n+1} = \varphi_{j+1/2}^n - \Delta t g(D^- \varphi_{j-p+3/2}^n, \cdots, D^+ \varphi_{j+q+1/2}^n), \tag{16.15}$$

其中 $D^- \varphi_{j+1/2} = \varphi_{j+1/2} - \varphi_{j-1/2}$, $D^+ \varphi_{j+1/2} = \varphi_{j+3/2} - \varphi_{j+1/2}$. 在式(16.15)中, 我们以 j 代 $j+1$, 得到

$$\varphi_j^{n+1} = \varphi_j^n - \Delta t g(D^- \varphi_{j-p+1}^n, \cdots, D^+ \varphi_{j+q}^n). \tag{16.16}$$

问题是构造合适的数值流通量 $g_{j+1/2}$, 不同精度的数值流通量, 也会得到不同精度的格式(16.16).

(2) 高维问题

以二维为例, 考虑离散形式

$$\begin{aligned}\varphi_{i,j}^{n+1} = \varphi_{i,j}^n - \Delta t g(&D_x^+ \varphi_{i-p,j-r}, \cdots, D_x^+ \varphi_{i+q,j+s+1},\\ &D_y^+ \varphi_{i-p,j-r}, \cdots, D_y^+ \varphi_{i+q+1,k+s}),\end{aligned} \tag{16.17}$$

其中 g 是 $(p+q+1)(r+s+1)$ 个变量的函数. 在文章[169]中作者给出 Hamilton-Jacobi-Godunov 格式

$$g_{\text{god}}(D_x^- \varphi_{ij}, D_x^+ \varphi_{ij}, D_y^- \varphi_{ij}, D_y^+ \varphi_{ij}) = \chi_{ij}^x \max(\chi_{ij}^x H_{ij}(u)),$$

式中 max 是对 $u \in [\min(D_x^- \varphi_{ij}, D_x^+ \varphi_{ij}), \max(D_x^- \varphi_{ij}, D_x^+ \varphi_{ij})]$ 取的, 而

$$\chi_{ij}^x = \text{sign}(D_x^+ D_x^- \varphi_{ij}), \quad \chi_{ij}^y = \text{sign}(D_y^+ D_y^- \varphi_{ij})$$

$$H_{ij}(u) = \chi_{ij}^y \min(\chi_{ij}^y H(u, v)),$$

$$v \in [\min(D_y^- \varphi_{ij}, D_y^+ \varphi_{ij}), \max(D_y^- \varphi_{ij}, D_y^+ \varphi_{ij})],$$

方法的详细描述请读者参考文献[169].

因为我们保持在任意时刻 level set 函数 $\varphi(x,t)$ 是 x 到运动界面的符号距离函数. 所以一旦求出了 t 时刻的 level set 函数, 界面法向 $\vec{n}$ 和曲率 k 可以直接由 level set 函数 $\varphi(x,t)$ 给出

$$\vec{n} = \frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|}, \tag{16.18}$$

$$k = \nabla \cdot \vec{n} = \nabla \cdot \left(\frac{\nabla \varphi}{|\nabla \varphi|}\right) = \frac{\varphi_y^2 \varphi_{xx} - 2\varphi_x \varphi_y \varphi_{xy} + \varphi_x^2 \varphi_{yy}}{(\varphi_x^2 + \varphi_y^2)^{3/2}}, \tag{16.19}$$

这样运动界面的位置以及法向、曲率等几何性质便求出来了.

16.3 重新初始化方程的求解

方程(16.9)是 Hamilton-Jacobi 方程,我们当然可以采用 16.2 中的方法,这里介绍两种 Godunov 方法. 首先将方程(16.9)写成如下形式

$$\varphi_\tau + \left\{\frac{S(\varphi_0)\varphi_x}{\sqrt{\varphi_x^2+\varphi_y^2}}\right\}\varphi_x + \left\{\frac{S(\varphi_0)\varphi_y}{\sqrt{\varphi_x^2+\varphi_y^2}}\right\}\varphi_y = S(\varphi_0), \tag{16.20}$$

其中 $S(\varphi_0)$是符号函数 $\mathrm{sign}(\varphi_0)$,我们取其光滑化为

$$S_\varepsilon(\varphi_0) = \frac{\varphi}{\sqrt{\varphi^2+\Delta x^2}}. \tag{16.21}$$

1. 一阶、单调 Godunov 格式[35,162]

一种比较简单的一阶、单调格式可描述如下

$$\varphi_{i,j}^{n+1} = \varphi_{i,j}^n - \Delta\tau S_\varepsilon(\varphi_{0,i,j})G(\varphi_{i,j}^n), \tag{16.22}$$

其中

$$S_\varepsilon(\varphi_{0,i,j}) = \frac{\varphi_{0,i,j}}{\sqrt{\varphi_{0,i,j}^2+\Delta x^2}},$$

$$G(\varphi_{i,j}^n) = \begin{cases} \sqrt{\max((a^+)^2,(b^-)^2)+\max((c^+)^2,(d^-)^2)}-1, & \varphi_{0,i,j}>0, \\ \sqrt{\max((a^-)^2,(b^+)^2)+\max((c^-)^2,(d^+)^2)}-1, & \varphi_{0,i,j}<0, \\ 0, & \text{否则}, \end{cases}$$

$$a = (\varphi_{i,j}-\varphi_{i-1,j})/h, \qquad b = (\varphi_{i+1,j}-\varphi_{i,j})/h,$$

$$c = (\varphi_{i,j}-\varphi_{i,j-1})/h, \qquad d = (\varphi_{i,j+1}-\varphi_{i,j})/h.$$

而 $z^+ = \max(z,0)$, $z^- = \min(z,0)$.

2. 修正的 Godunov 方法[72]

为了提高精度,我们由 ENO 或 WENO 方法构造从左侧和右侧的导数离散值 φ_x^+, φ_x^- 分别是来代替一阶 Godunov 方法中的前差分和后差分 a,b,c,d. 时间导数离散采用二阶或三阶 TVD-Runge-Kutta 方法.

首先定义

$$s = \frac{S(\varphi_0)(|\varphi_x^+|-|\varphi_x^-|)}{\varphi_x^+-\varphi_x^-}, \tag{16.23}$$

对 φ_x 作如下离散

$$
\varphi_x=\begin{cases}
\varphi_x^-, & S(\varphi_0)\varphi_x^+\geqslant 0,\quad S(\varphi_0)\varphi_x^-\geqslant 0,\\
\varphi_x^+, & S(\varphi_0)\varphi_x^+\leqslant 0,\quad S(\varphi_0)\varphi_x^-\leqslant 0,\\
0, & S(\varphi_0)\varphi_x^+> 0,\quad S(\varphi_0)\varphi_x^-< 0,\\
\varphi_x^-, & S(\varphi_0)\varphi_x^+< 0,\quad S(\varphi_0)\varphi_x^-> 0, s>0,\\
\varphi_x^+, & S(\varphi_0)\varphi_x^+< 0,\quad S(\varphi_0)\varphi_x^-> 0, s\leqslant 0.
\end{cases} \tag{16.24}
$$

同样处理 φ_y. 当然式(16.24)是与上述公式(16.22)完全相同,只是表达方式不同而已.

对方程(16.9)进行时间步的迭代达到稳定解,也就是 $\varphi_t\cong 0$. 数值上,要求

$$\sum_{i,j}\left|\varphi_{i,j}^{n+1}-\varphi_{i,j}^{n}\right|<\varepsilon,$$

ε 一个小量,一般可取为 $0.01\Delta x$,一般只需 3~4 次迭代,甚至一次迭代即可达到要求.

16.4　物理量的控制方程的求解

一般来讲,主场的控制方程如果是守恒律形式可以用 ENO 或 WENO 方法及间断 Galerkin 方法求解. 如果是对流扩散方程可以用局部间断 Galerkin 方法求解. 我们不再讨论物理量控制方程的求解方法,只是着重讨论一下解 level set 函数方程如何与求解物理量控制方程结合起来.

界面追踪的目的是在界面附近作尽可能的精细的处理,以期望在界面附近和界面上达到所要求的精度. 我们已经通过各种方法得到 level set 函数,即计算区域中任意网格点到运动界面的符号距离函数 $\varphi(x,t)$. 也就知道了运动界面的位置和法向、曲率等几何特征. 然后在进行物理量的控制方程的求解时,怎样利用这些信息达到更加精确地求解. 也就是 level set 函数与物理量的控制方程如何耦合起来. 以下介绍三种方式.

1. 外插值方法离散界面附近的点

这种方式是把物质界面看成内部边界,两种介质 A、B 在两个区域 $\Omega_2(t)$、$\Omega_2(t)$中分别求解,假设界面是完全间断的. 一般来讲,一种数值方法,总是在离散某个点时,用到周围的点的函数值,在界面附近的一种介质点上的离散要用到另一个区域中点的函数值. 界面追踪很重要的一点就是,一种介质的物理量的求解不可用到另一种介质的物理量,否则就会模糊界面,从而使完全间断的界面变成了大梯度区,而失去了界面追踪的效果. 这时我们可以采用外插值的方法,避免使用另一种介质点上的函数值.

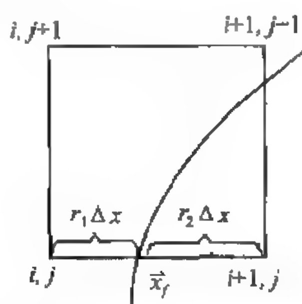


图 16.1 运动界面附近的特殊处理

图 16.1 所示的情形为例，$\bar{x}_f=(x_f,y_j)\in\Gamma(t)$，设 $x_i\leqslant x_f<x_{i+1}$，由于 level set 函数是符号距离函数的特性，有

$$
\begin{aligned}
x_{i+1}-x_f&=\left(\frac{\varphi_{i+1,j}}{\varphi_{i+1,j}-\varphi_{i,j}}\right)\Delta x\equiv r_1\Delta x,\\
x_f-x_i&=-\left(\frac{\varphi_{i,j}}{\varphi_{i+1,j}-\varphi_{i,j}}\right)\Delta x\equiv r_2\Delta x,
\end{aligned}
\tag{16.25}
$$

然后利用他们来构造插值多项式 P^{L}、P^{R}. 也就是利用 $(x_{i-2,j},g_{i-2,j})$，$(x_{i-1,j},g_{i-1,j})$，$(x_{i,j},g_{i,j})$，(x_f,g_f) 来构造插值多项式 P^{L}，用 $(x_{i+3,j},g_{i+3,j})$，$(x_{i+2,j},g_{i+2,j})$，$(x_{i+1,j},g_{i+1,j})$，(x_f,g_f) 来构造 P^{R}，P^{L}、P^{R} 分别用来离散界面左侧和右侧附近的点. 其中 g 表示某个物理量.

2. 将界面附近进行光滑化[216]

这种方式是把整个计算区域的介质看成不均匀的一种介质，整个区域一起求解. 将界面光滑化，界面附近看成大梯度区域进行计算. 如介质 A 的某个物理量是 g_A，介质 B 的该物理量是 g_B. 作光滑化将其统一为

$$
g=\begin{cases}
g_A, & \varphi>\alpha,\\
g_B, & \varphi<-\alpha,\\
\bar{g}+\Delta g\sin(\pi\varphi/(2\alpha)), & |\varphi|\leqslant\alpha,
\end{cases}
\tag{16.26}
$$

其中 $\bar{g}=(g_A+g_B)/2$，$\Delta g=(g_A-g_B)/2$.

光滑化是为了避免数值上的麻烦，使求解方便. 整个区域一起来求解，难免将界面模糊化，得不到十分尖锐的图像，但在任意时刻我们都是首先追踪到界面的位置，然后再作光滑化，而且追踪界面是利用专门的方程来实现，这种模糊化不会传播，可以控制在确定的有限几个网格内.

3. ghost 方法[72]

level set 方法最大的优点就是避免了显式的追踪运动界面，与以往的格子类

方法(如 PIC、MAC 等)及直接的波前追踪方法相比,大大提高了对复杂界面以及界面的复杂运动(如破碎、碰撞、翻卷等拓扑发生变化)的处理能力. 在求解物理方程时,利用上述方法对界面附近作精细处理,也就是实现界面追踪和物理方程求解耦合时,又对界面附近的点作特殊的计算求值,编程时要人为地操作. 这在一定程度上削弱了方法的优点,同时也降低了方法在处理复杂界面时的能力. 事实上,我们在求解物理方程时,对运动界面的处理,关键要解决的就是在求解界面一边的物理量时要用到另一边的物理量函数值. 当我们把界面看成严格的间断面(线)时,问题在于求解一种流体区域上 t_{n+1}时间层的函数值时,我们不可以直接的利用另一种流体区域上的函数值. 所以我们首先要得到那些位于界面另一边其实并不存在但又要用到的网格上的函数值.

为了解决上述问题,Osher、Glimm 等人最先使用所谓 ghost 网格方法. 设整个计算区域是 Ω,流体 A 所在的区域记作 Ω_1,流体 B 所在的区域记作 Ω_2. 在 Ω_1 内的网格称为流体 A 的真实网格;而区域 Ω_2 内的网格称为流体 B 的真实网格. 我们在区域 Ω_2 内定义流体 A 的所谓"ghost"网格,并根据间断关系及提高分辨率的目的给这些"ghost"网格赋以函数值. 这样在整个介面附近的计算区域中的每个网格上都有了流体 A 的物理量的函数值;同样,在 Ω_1 内定义流体 B 的"ghost"网格,使得整个介面附近的计算区域的每个网格上都有流体 B 的函数值. 这样在计算中,对两种流体分别在整个计算区域上进行计算. 不需要再对界面附近作任何特殊处理,方便了编程,而且容易处理界面的复杂变形. 下面我们以空气动力学 Euler 方程为例说明 ghost 网格方法.

(1) 一维情形

一维 Euler 方程有三个分量,密度 ρ,动量 ρu,能量 e. 在 t_n 时刻,已知区域 Ω_1 中流体 A 的各个函数值,为了求解下一个时刻 t_{n+1}的流体 A 的函数值,需要知道 t_n 时刻在区域Ω_2 中的流体 A 的函数值,即要给"ghost"网格赋值. 由于物理的原因,在跨过运动界面,压力 p 和速度 u 是连续的. 所以"ghost"网格上的压力和速度的值应该取区域 Ω_2 中真实流体的压力和速度. 我们可以直接从流体 B 的压力和速度复制过来. 这样就定义了压力和速度在"ghost"网格上的值,还有一个自由度需要确定. 由于熵 S 在接触间断中普遍是间断的,所以我们选它作为第三个需要确定的自由度.

由于熵是间断的,可以通过外插值来确定它在"ghost"网格上的值,由于高阶插值会产生所谓的"overheating"误差(详细讨论请参阅文献[72]),我们宁愿选择常数外插值. 如图 16.2 所示的情形,level set 函数在网格 i 和 $i+1$ 之间改变符号,即运动界面落在节点 i 和 $i+1$ 之间. 在点 i 及其左边的节点上定义的是流体 A 的函数值;在点 $i+1$ 及其右边的节点上定义的是流体 B 的函数值. 为了计算流体 A 的函数值,需要定义"ghost"网格 $i+1$ 及其以右

的函数值. 其上的压力和速度值可以从流体 B 的真实网格上复制过来. 而对于熵,我们采用常数插值,为了削弱"overheating"现象,采用所谓的"isobaric fix"技术,即将 i 点的熵修改为 $i-1$ 点的熵,然后作常数插值,也就是

$$S_i = S_{i-1}, \quad S_{i+1}^G = S_{i-1}, \quad S_{i+2}^G = S_{i-1}, \cdots$$

式中的上标 G 表示"ghost"网格. 现在在点 i 和界面右边的"ghost"网格上压力 p、速度 u、熵 S 都有了赋值. 于是"ghost"网格上的密度 ρ、动量 $m=\rho u$、能量 e 可定义为

$$\rho=\left(\frac{p}{S}\right)^{\frac{1}{\gamma}}, \quad m=\rho u, \quad e=\frac{p}{\gamma-1}+\frac{1}{2}\rho u^2.$$

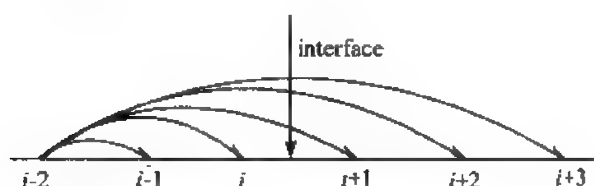


图 16.2 一维 ghost 网格

(2) 多维情况

ghost 网格在一维情形实质上是常数外插值,还看不出它的优越性,我们可以直接用常数插值来代替. 在多维情况下,如果要进行插值,最直观合理的方法就是沿着界面的法方向作插值了. 然而在界面比较复杂的情况,这种插值是困难的. 我们希望将需要插值的变量(如熵)连续甚至常数地扩展到界面的另一边. 这时,可以通过求解下面的方程来实现

$$I_t \pm \vec{n}\cdot\nabla\cdot I=0, \tag{16.27}$$

其中,I 代表要插值扩展的变量,如熵 S. $\vec{n}=\frac{\nabla\varphi}{|\nabla\varphi|}$是界面的法向单位矢量. 由$\vec{n}$的定义可知,它总是由 $\varphi<0$ 的区域指向 $\varphi>0$ 的区域. 因此,如果我们要将变量从 $\varphi<0$ 的区域向 $\varphi>0$ 的区域扩展,在方程(16.27)中用+;而反之,用-.

与一维情形类似,采用"isobaric fix"技术,在求解方程(16.27)时,当用+,即变量从 $\varphi<0$ 的区域向 $\varphi>0$ 的区域扩展时,保持 $\varphi<-\varepsilon$ 的区域的函数值不变;反之,保持 $\varphi>\varepsilon$ 的区域的函数值不变. ε 一般可以取为 $1.5\Delta x$.

在多维情况,变量有密度 ρ,压力 p,速度 $\vec{u}$. 当然压力 p 跨过界面仍然是连续的,我们可以同一维时的处理,在"ghost"网格上的赋值直接从界面另一边的真实流体网格上复制过来. 但速度有多个方向,将其分解到界面的法线方向$\vec{n}$和界面的切线方向$\vec{n}^{\perp}$上,分别记为 v^n 和 v^t(如果是三维情况,则 v^t 是矢量,稍后讨论)

$$v^n=\vec{u}\cdot\vec{n}, \quad v^t=\vec{u}\cdot\vec{n}^{\perp}=-un_y+vn_x.$$

可以认为法向速度 v^n 是连续的,处理方法同压力 p;而切向速度有可能存在大的间断,需要作类似熵 S 的处理,同样采用"isobaric fix"技术,用切向速度 v^t 代替方程(16.27)中的 I 迭代至稳定解(实际上,一般数值方法只是需要界面另一边的一个或几个网格,计算中并不需要真正得到稳定解,只要迭代几步,使要扩展的函数扩展到所需的网格即可,这要根据具体的数值方法和界面复杂性而定,一般只需要 10 步左右). v^t 扩展后,在"ghost"网格上将真实流体网格上的法向速度 v^n 与"ghost"网格上切向速度 v^t 合成为"ghost"网格上的速度.

三维情况,$\vec{u}=(u,v,w)$,速度法向分量为 $v^n=\vec{u}\cdot\vec{n}$,则速度 $\vec{u}$ 投影到运动界面的切平面的分量为 $\vec{u}-v^n$. 把方程(16.27)作用到 $\vec{u}-v^n$ 上,得到"ghost"网格上的速度的切向分量,然后再与真实流体网格上的速度法向分量合成为"ghost"网格的整体速度.

level set 方法不需要显式的追踪运动界面,克服了一般波前追踪方法难于处理复杂的物质界面,及其发生拓扑变形情况的弱点,而且边界面的一些特征(如法向,曲率等)直接隐含在 level set 函数中,便于精细地描述界面. 还易于向高维推广. 已经被用来处理几何、流体力学、工艺过程等许多方面的问题. 在这方面以 Osher 为首的研究群体,Chen[35],Fedkiv[72],Merriman[162],Sussman[216],以及 Sethian 和 Strain[14,210~212,193]等人在这方面做了很多杰出的工作.

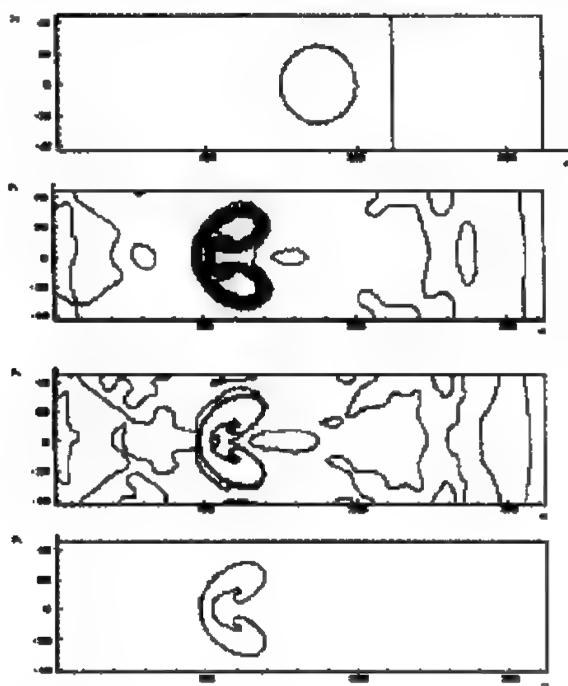


图 16.3　利用 RKDG 方法结合 level set + ghost 网格进行界面追踪所计算的激波打到气泡的模拟图像

参考文献

1 Adjerid S and Flaherty J. A moving finite element method with error estimation and refinement for 1D time dependent PDEs. SAIM J Numer. Anal., 1986, 23-24:778～796

2 Adalsteinsson D and Sethian J A. A unified level set approach to etching, deposition and lithography I Algorithms and two-dimensional simulations. J Comput Phys, 1995, 120:128

3 Adalsteinsson D and Sethian J A. A unified level set approach to etching, deposition and lithography. II. Three-dimensional simulations. J Comput Phys, 1995, 122:348

4 Adalsteinsson D and Sethian J A. The fast construction of extension velocities in level set methods. J Comput Phys, 1990, 148-1:2～22

5 Alcrudo F and Garcia-Navarro P. A high-resolution Godunov-type scheme in finite volumes for the 2D shallow-water equations. Inter J Numer Methods in Fluids, 1993, 16:489～505

6 Anastasiou K and Chan C T. Solution of the 2D shallow water equations using the finite volume method on unstructured triangular meshes. Inter J Numer Methods in Fluids, 1997, 24:1225～1245

7 Ashgriz N and Poo J Y. FLAIR: Flux line-segment model for advection and interface reconstruction. J Comput Phys, 1991, 39:449～468

8 Athey D R. A finite difference scheme for melting problems. Int J Math Appl, 1974, 13:353～366

9 Babuska I. Error bounds for finite element method. Numer Math, 1971, 16:322～333

10 Baines M J. Moving finite element methods for evolutionary problems. I Theory, element method. J Comput Phys, 1988, 79:245～269

11 Baines M J. An analysis of the moving finite element procedure. SIAM J Numer Anal, 1991, 28-5:1323～1349

12 Balsara D and Shu C W. Monotonicity preserving WENO schemes with increasingly high order of accuracy. J Comput Phys, 2001, 160:405～452

13 Balzano A. MOSQUITO: An efficient finite difference scheme for numerical simulation of 2D advection. Inter J Numer. Methods in Fluids, 1999, 31:481～496

14 Barth T J and Sethian J A. Numerical scheme for the Hamilton-Jacobi and level set equations on triangulated domains. J Comput Phys, 1998, 145:1～40

15 Ben-Artzi M. The generalized Riemann problem for reactive flows. J Comput Phys, 1987, 81:70～101

16 Bey K S. A Patro hp-version discontinuous Galerkin methods for hyperbolic conservation

laws: A parallel strategy. Inter J Numer Methods Engrg, 1995, 38:3889～3908

17 Bey K S and Oden J T. Hp-version discontinuous Galerkin methods for hyperbolic conservation laws. Comput. Methods Appl Engrg, 1996, 133:259～286

18 Bey K S. Oden J T and Patra A. A parallel hp-adaptive discontinuous Galerkin method for hyperbolic conservation laws. Appl Numer Math 1996, 20:321～386

19 Boris J P and Book D L. Flux corrected transport, I SHASTA J Comput Phys, 1973, 11: 38～69

20 Bowyer A. Computing Dirichlet tessellation, Computer J. 1981, 24:167～172

21 Brattkus K and Meiron D I. Numerical simulations of unsteady crystal growth. SIAM J Appl Math, 1992, 52:1303

22 Brenier Y And Osher S. Approximate Riemann solvers and numerical flux functions. SIAM J Numer Anal, 1986, 23-2:159～281

23 Brenner S C and Scott L R. The Mathematical Theory of Finite Element Methods, Springer, 1994

24 Brezzi F. On the existence, uniqueness and approximation of saddle-point problems arising from Lagrangian multipliers. SIAM J Numer Anal, 1974, 13:185～197

25 Calhoun D and LeVeque R J. A cartesian grid finite volume method for the advection diffusion equation in irregular geometries. J Comput Phys, 2000, 157:143～180

26 Carlson N N and Miller K. Design and application of a gradient-weighted moving finite element code I: In one dimension. SIAM J Sci Comput, 1998, 19-3:728～765

27 Carlson N N and Miller K. Design and application of a gradient- weighted moving finite element code I: In two dimension. SIAM J Sci Comput, 1998, 19-3:766～798

28 Garnien G et al. On the use of shock capturing schemes for large-eddy simulation. J Comput Phys, 1999, 153:273～311

29 Carpenter R L Droegemeier K K Woodward P R et al. Application of the piecewise parabolic method (PPM) to meteorological modeling Monthly Weather Review, 1990, 118:586

30 Chakravarthy S R and Osher S. High resolution applications of the Osher upwind scheme for the Euler equations. AIAA paper presented at 6th CFD Conference 1983

31 Chan C T and Anastasiou K Solution of incompressible flows with or without a free surface using the FVM on unstructured triangular meshes. Inter J Numer Methods in Fluids, 1999, 29:35～57

32 Changqing Hu, Chi-Wang Shu. Weighted essentially non-oscillatory schemes on triangular meshes. NASA/CR-1998-208459, ICASE Report No, 98～32

33 Chavent G and B Cocdkburn. The local projection P^0P^1-discontinuous Galerkin method for scalar conservation law. M^2AN. 1989, 23:565～592

34 Chavent G and Salzano G. A finite element method for the 1D water flooding problem with gravity. J Comput Phy, 1982, 45:307～344

35 Chen S, Merriman B, Osher S and Smereka P. A simple level set method for solving Stefan problems. J Comput Phys, 1997, 135:8～29
36 Chen Z, Cockburn B, Jerome J, and Shu C W. Mixed-RKDG finite element methods for the 2-D hydrodynamic model for semiconductor device simulation. VLSI Design, 1995, 3: 145～158
37 Chi-Wang Shu. TVB boundary treatment for numerical solutions of conservation laws. Mathematics of Computation, 1987, 49-179:123
38 Chi-Wang Shu. TVB uiformly high -order schemes for conservation laws. Mathematics of Computation, 1987, 49-179:105
39 Chorin A J. A numerical method for solving incompressible viscous flow problems. J Comput Phys, 1967, 2:12～26
40 Chorin A J. Flame advection and propagation algorithm. J Comput Phys, 1980, 35:1～11
41 Chorin A J. Curvature and solidification. J Comput Phys, 1985, 57:472～490
42 ChorinA J and Marsden J E. A Mathematics Introduction to Fluid Mechanics, Springer-Verlag,1990
43 Ciarlet P G. The Finite Element Method for Elliptic Problems, North-Holland,Amsterdam,1978
44 Colella P. A direct eulerian MUSCL schemes for gas dynamics. SIAM J Sci Stat comput, 1985, 6-1:104
45 Colella P and Woodward P R. The piecewise parabolic method (PPM) for gas-dynamics simulations. J Comput Phys, 1984, 54:174
46 Courant R and Friedrichs K O. Supersonic Flow and Shock waves, Interscience Publishers,1953
47 Courant R, Friedrichs K O and Lewy H. On the partial difference equations of mathematical Physics, Mathematische Annalen, 1928, 100:32～74
48 Courant R and Hilbert D. Methods of Mathematical Physics, Interscience Publishers Inc, 1953
49 Cockburn B, Hou S and Shu C W. TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for scalar conservation laws IV: The multidimensional case. Math Comp, 1990, 54:545～581
50 Cockburn B and Gremaud P A. Error estimates for finite element methods for nonlinear conservation laws. SIAM J Numer Anal, 1996, 33:522～554
51 Cockburn B and Shu C W. TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for scalar conservation laws V: Multidimensional systems. J Comput Phys, 1998, 141:199～224
52 Cockburn B and Shu C W. The P^1-RKDG method for two-dimensional Euler equations of gas dynamics. ICASE Report 1991, 91～132

53 Cockburn B and Shu C W. TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element method for scalar conservation laws II: General framework. Math Comp, 1989, 52:411～435

54 Cockburn B, Sen-Yih Lin and Chi-Wang Shu. TVB Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin FEM for conservation laws III: one dimensional systems, J Comput. Phys, 1989, 84:90～113

55 Cockburn B, Hou S and Chi-Wang Shu. The Runge-Kutta local projection discontinuous Galerkin finite element methods for conservation laws IV: The multidimensional case. Mathematics of Computation, 1990, 54:545～581

56 Cockburn B and Shu C W. The Runge-Kutta local projection P^1-discontinuous Galerkin method for scalar conservation laws. RAIRO Model Math Anal Numer, 1991, 25:337～361

57 Cockburn B and Shu C W. The local discontinuous Galerkin method for time-dependent convection-diffusion systems. SIAM J Numer Anal, 1998, 35:2440 -2463

58 Crandall M and Majda A. Monotone difference approximate for scalar conservation Laws. Math Comp 1980, 34:1－21

59 Davidson L. A pressure correction method for unstructured meshes with arbitrary control volumes. Inter J Numer Meth in Fluids, 1996, 22:265～281

60 Davis S F. Simplified second order Godunov type methods. SIAM J Sci Statist Comput, 1988, 9:445～473

61 Davis S F. An interface tracking method for hyperbolic systems of conservation laws. App Numer Math, 1992, 10:447～472

62 Dawson C N. Godunov-mixed methods for advection-diffusion equations in one space dimension. SIAM J Numer Anal, 1991, 28:1282～1309

63 Dawson C N. Godunov-mixed methods for advection-diffusion equations in multidimensions. SIAM J. Numer. Anal. 1993, 30:1315～1332

64 Deconinck H, et al. Multidimensional upwind schemes based on fluctuation-splitting for systems of conservation laws. Computational Mechanics, 1993, 11:323－340

65 Delaunay B. Neue Darstallung der geometriachen Krystallo-graphie. Zeitschr. Krystallographie, 1932, 84:109～149

66 Dukowicz J K. A general, non-iterative Riemann solver for Godunov's method. J Comput Phys, 1985, 61:119～137

67 Engquist B and Osher S. One-sided difference approximations for nonlinear conservation laws. Math Comp, 1981, 36:321～351

68 Eriksson K, Johnson C and Thomee V. Time discretization of parabolic problems by the discontinuous Galerkin method. RAIRO. Anal Uumer 1985, 19:912～928

69 Eriksson K and Johnson C. Adaptive streamline diffusion finite element methods for stational convection-diffusion problems. Math. Comp., 1993, 60:167～188

70 Evans M E and Harlow F H. LA-2139, 1957

71 Falk R S and Osborn J E. Error estimates for mixed methods. RAIRO Numer Anal, 1980, 14:249～277

72 Fedkiw R P, Aslam T, Merriman B and Osher S. A non-oscillatory Eulerian approach to inter-faces in multi-material flows (the Ghost Fluid Method). J Comput Phys, 1999, 152:457～492

73 Filippova O and Hanel D. Acceleration of lattice-BGK schemes with grid refinement. J Comput Phys, 2000, 165:407～427

74 Fromm J E. A method for reducing dispersion in convective difference schemes. J Comput Phys, 1968, 2:176～189

75 付德薰等. 流体力学数值模拟,国防工业出版社, 1993

76 Furzeland R M. A Comparative study of numerical methods for moving boundary problems. Int J Maths App, 1980, 20:411～429

77 Ganosa J and Gazdag J. The Korteweg-de Vries Burgers equation. J Comput Phys, 1977, 23:293～403

78 Gardner L R T and Gardner G A. Solitary waves of regularized long-wave equation. J Math Phys 1990, 91:441～459

79 Gelinas R J, Doss S K and Miller K. The moving finite element method: Applications to general partial differential equations with multiple large gradients. J Comput Phys, 1981, 40:202～249

80 Gentry R A, Martin R F and Daly B J. J Comput Phys, 1996, 1

81 Glimm J. Solution in the large for nonlinear hyperbolic systems of equations. Comm Pure and Appl Math, 1965, 18:697～715

82 Godunov S K and Ryabenkii V S. Theory of Difference Schemes. An Introduction to the underlying Theory, North-Holland, 1987

83 Gueyffier, et al. Volume-of Fluid interface tracking with smoothed surface stress methods for 3D flows. J Comput Phys, 1999, 152:423～456

84 Gupta S C, Laitinen E and Valtteri T. Moving grid scheme for multiple moving boundaries. Comput Meth Appl Engrg, 1998, 167:345～353

85 Hall C A, Cavendish J C and Frey W H. The dual variable method for solving fluid flow difference equations on Delaunay triangulations. Computers & Fluids, 1991, 20-2:145～164

86 Hansbo P. The characteristic streamline diffusion method for convection-diffusion problems. Comput. Methods Appl Mech Engrg, 1992, 96:239～253

87 Harlow F H and Welch J F. Numerical calculations of time-dependent viscous incompressible flow of fluid with free surface. Phys Fluids, 1965, 8:2182～2189

88 Atkins H L and Shu C-W. Quadrature-free implementation of discontinuous Galerkin method for hyperbolic equation. AIAA J, 1998, 36-5:775～782

89 Harten A. High resolution schemes for hyperbolic conservation laws. J Comput Phys, 1983, 49:357~393

90 Harten Ami Lax P d and Van Leer B. On upstream difference and Godunov-type schemes for hyperbolic conservation laws. SIAM Review, 1983, 25:35~61

91 Harten A. On a class of high resolution total variation stable finite difference schemes. SIAM J Numer Anal, 1984, 21:1~23

92 Harten A. On a large time-step high resolution scheme. Mathematics of Computation, 1986, 46:379~399

93 Harten A. On high-order accurate interpolation for non-oscillatory shock capturing schemes, in Oscillation Theory. Computation and Methods of Compensated Compactness, C Dafermos et al eds. Springer-Verlag, New York, 1986, 71~105

94 Harten A, Engquist B, Osher S and Chakravathy R. Some results on uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes. Applied Numerical Mathematics, 1986, 2:347~377

95 Harten A and Osher S. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, I *SIAM* J Numer Ana, 1987, 24:279~309

96 Harten A. ENO schemes with subcell resolution. J Comput Phys, 1989, 83:148

97 Harten A, Engquist B, Osher S and Chakravathy R. Uniformly high order accurate essentially non-oscillatory schemes, III, J Comput. Phys, 1987, 71:231~303; 1997, 131:3~47

98 Herman R L and Knickbocker C J. Numerically induced shift in KdV soliton. J Comput Phys, 1993, 104:50

99 Hirt C W. Heuristic stability theory for finite difference equations. J Comput Phys, 1968, 2:339~355

100 Hirt C W, Nichols B D and Romero N C. SOLA—A numerical solution algorithm for transient fluid flows, *LA*-5852, 1975

101 Jiwen Wang and Ruxun Liu. A comparative study of finite volume methods on unstructured meshes for simulation of 2D shallow water wave problems. Mathematics and Computers in Simulation, 2000, 53:171~184

102 Hirt C W and Nichols B D. Volume of fluid (VOF) method for the dynamics of free boundaries. J Comput Phys, 1981, 39:201~225

103 Hrymak A N, McRae J and Westerberg A W. An implementation of a moving finite element method. J Comput Phys, 1986, 63:168~190

104 Hu C and Shu C-W. A discontinuous Galerkin finite element method for Hamilton-Jacobi equations. NASA/CR-1998-206903; ICASE Report No. 98-2

105 Hu K, Mingham C G and Causon D M. A bore-capturing FVM for open-channel flows. Inter J Numer Meth in Fluids, 1998, 28:1241~1261

106 Huang Chung-Yuan. Recent progress in multiblock hybrid structured and unstructured

mesh generation. Computer Meth in Appl Mech Engrg, 1997, 150:1～24

107 Hughes T J R and Brook A. Streamline upwind-Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stockes equations. Comput Methods Appl Mech Engrg, 1982, 32:199～259

108 Hughes T J R, Mallet M and Mizukami A. A new finite element formulations for computational fluid dynamics: II Beyond SUPG Comput Methods Appl Mech Engrg, 1986, 54:341～355

109 Hulme B L. One-step piecewise polynomial Galerkin methods for initial value problems. Math Comp, 1972, 26:415～426

110 Jameson A, Schmidt W, Turkel E Numerical solution of the Euler equations by finite-volume methods using Runge-Kutta time-stepping schemes. AIAA Paper, 81～1259

111 Jameson A, Marvrilips D. Finite volume solution of the two-dimensional Euler equations on a regular triangular meshes. AIAA Journal, 1986, 24:611～618

112 Jameson A. Positive schemes and shock modeling for compressible flows. Intern J Numer Methods in Fluids, 1995, 20:743～770

113 Jamet P. Galerkin-type approximations which are discontinuous in time for parabolic equations in a variable domain. *SIAM* J Numer Anal, 1978, 46:1～26

114 Jiang G-S, Levy D et al. High resolution non-oscillatory central schemes with nonstaggered grids for hyperbolic conservation laws. *SIAM* J Numer Anal, 1998, 35:2147～2168

115 Jiang G and Shu C-W. On a cell entropy inequality for discontinuous Galerkin methods. Math Comp, 1994, 62:531

116 Jiang G and Shu C-W. Efficient implementation of weighted ENO schemes. J Comput Phys, 1996, 126:202～228

117 Jimack P K and Wathen A J. Temporal derivatives in the FEM on continuously deforming grids. *SIAM* J Numer Anal, 1991, 28:990～1003

118 Jin Wang and Ruxun Liu. A new approach to design high-order schemes. J Comput Appl Math, 2001, 134:59～67

119 Jing Shi, Changqing Hu and Chi-Wang Shu. A technique of treating negative weights in WENO schemes. NASA/CR-2000-210632, ICASE Report No. 2000-49

120 Johnson C, Navert U. and Pitkaranta J.. Finite element methods for linear hyperbolic problems. Comput Methods Appl Mech Engrg 1984, 45:285～312

121 Johnson C and Pitkaranta J. Analysis of discontinuous Galerkin methods for a scaler hyperbolic equation. Math Comp, 1986, 46:1～26

122 Johnson C and Saranen J. Streamline diffusion methods for the incompressible Euler and Navier-Stokes equations. Math Comp, 1986, 47:1～18

123 Johnson C. Numerical Solution of Partial Diffusion Equations by Finite Element Method, Cambridge University Press, 1987

124 Johnson C, Schatz A H and Wahlbin L B. Crosswind smear and pointwise error in streamline diffusion finite element methods. Math Comp, 1987, 49-179:25～38

125 Johnson C. Adaptive finite element methods for diffusion and conservation problems. Comput Methods Appl Mech Engrg, 1990, 82:301～322

126 Johnson C and Hansbo P. Adaptive finite element methods for compressible flow. Comput Methods Appl Mech Engrg, 1991, 87:267～280

127 Johnson C and Szepessy A. Shock-capturing streamline diffusion finite element methods for nonlinear conservation laws. Recent Developments in Computational Fluid Mechanics, AMD, ed. By T E Tezdurar and T J R Hughes

128 Johnson I W, Wathen A J and Baines M J. Moving finite element methods for evolutionary problems. II Applications J Comput Phys, 1988, 79:270～297

129 Kim S O and No H C. Second-order model for free surface convection and interface reconstruction. Int J Numer Meth Fluid, 1998, 26:79～100

130 Kun Xu , Li-Shi Luo. Connection between the lattice Boltzmann equation and the beam scheme. NASA/CR-1999-209001 ICASE Report No. 99-10

131 Lafaurie B et al. Modeling merging and fragmentation in multiphase flows with SURFER. J Comput Phys, 1994, 113:134～147

132 Lax P D. Shock waves and entropy, Contributions to Nonlinear Functional Analysis. Proc Symposium at the University of Wisconsin, 1971, 603

133 LeVeque R J. High resolution finite volume method on arbitrary grid via wave propagation. J Comput Phys, 1988, 78:36～63

134 LeVeque R J. Numerical Methods for Conservation Laws, Birkhauser Verlag, Basel, 1990

135 LeVeque R J and Shyue K M. A Front tracking method for conservation laws in one dimension. J Comput Phys, 1992, 101:130～139

136 LeVeque R J and Shyue K M. One-dimensional front tracking based on high resolution wave propagation methods. SIAM J Sci Comput, 1995, 16:348～377

137 李元香,康立山,陈毓屏.格子气自动机,清华大学出版社,1994

138 Lin Q and Zhou A. Convergence of the discontinuous Galerkin method for a scalar hyperbolic equation. Acta Math Sci, 1993, 13:207～210

139 Liska K and Wendroff B. Two-dimensional shallow water equations by composite schemes. Inter J Numer Method in Fluids, 1999, 30:461

140 刘儒勋.关于非线性计算稳定性,力学学报,1984, 16-5:529

141 Liu Ruxun. An element analysis approach of the moving finite element method. J. China Univer. Sci and Tech, Supplement 1986, 1～6

142 Liu Ruxun. The d'Alembert formula & the direct or inverse problems. Acta Mathematica Scientia, 1990, 10-1:47～56

143 Liu Ruxun. The design of characterizing integral schemes and the applications to shallow water problem. Applied Mathematics and Mechanics, 1992, 13:215～222

144 刘儒勋.差分格式余项效应研究,计算物理,1992,9-4:479

145 Liu Ruxun and Xuan Benjin. A simplified moving finite element method. J of Hydrodynamics Ser B, 1993, 3:25~31

146 Liu Ruxun and Zhou Zhaohui. The remainder-effect analysis of finite difference schemes and the applications. Applied Mathematics and Mechanics, 1995, 16-1:87

147 Liu Ruxun, et al. The designing approach of finite difference scheme by controlling remainder-effect. Int. J Numer Methods in Fluids, 1999, 31:523

148 刘儒勋,王志峰.数值模拟方法和运动界面追踪,中国科学技术大学出版社,2001.10

149 Liu X-D, Osher S. Convex ENO high order multi-dimensional schemes without field by field decomposition or staggered grids. J Comput Phys, 1998, 142:304~338

150 Lo S H. A new mesh generation scheme for arbitrary planar domains. Inter J Numer. Methods in Engrg, 1985, 21:1403~1426

151 Lock N, Jaeger M, Madale M And Occell. R. Local mesh adaptation technique for front tracking problems. J Comput Phys, 1998, 28:719~736

152 罗振东.有限元混合法理论基础及其应用,山东教育出版社,1996

153 Luo Zhendong and Liu Ruxun. Mixed finite element analysis and numerical solitary solution for the RLW Equation. SIAM J Numer Anal, 1998, 36:89~104

154 罗振东,刘儒勋. Burgers 方程的混合元分析及其数值模拟,计算数学,1999, 21-3:257

155 Lynch D R. Unified approach to simulation on deforming elements with application to phase change problems. J Comput Phys, 1982, 47:387~411

156 Marshall G and Menendez A N. Numerical treatment of non-conservation forms of the equations of shallow water theory. J Comput Phys, 1981, 44:167~188

157 Marshall G. A Front-tracking methods for one-dimensional moving boundary problems. SIAM J Sci Stat Comput, 1986, 7:252~263

158 Mashayek F and Ashgriz N. A hybrid finite-element-volume-of-fluid method for simulating free surface flows and interfaces. Int J Numer Method Fluid, 1995, 20:1363~1380

159 Medale M and Jaeger M. Numerical simulation of incompressible flows with moving interfaces. Int J Numer Meth Fluid, 1997, 24:615~638

160 Miller K and Miller R N. Moving finite elements. I SIAM J Numer Anal, 1981, 18-6: 1017~1032

161 Miller K. Moving fiinite elements II. *SIAM* J Numer Anal, 1981, 18-6:1032~11057

162 Merriman B. Bence J K and Osher S. Motion of multiple junctions: A level set approach. J Comput Phys, 1994. 112:334

163 Miyata H. Finite difference simulation of breaking waves. J Comput Phys, 1986, 65: 179~214

164 Moretti G. The λ-scheme. Computers and Fluids, 1979, 7:191~205

165 Muller J-D, Roe P L and Deconinck H. A frontal approach for internal node generation in

Delaunay triangulations Inter J for Numer Methods in Fluids, 1993, 17:241～255

166 Niijima. Pointwise error estimates for a streamline diffusion finite element scheme. Math Comp, 1990, 56:707～719

167 Noh W F and Woodward P. SLIC(Simple Line Surface Calculation) (Eds: A I van de Vooren and P J Zandbergen). Lecture Notes in physics, Vol 59, Springer, New York, 1976

168 Osher S. Riemann solvers, the entropy condition, and difference approximation. SAIM J Numer Anal, 1984, 21-2:217～235

169 Osher S and Sethian J A. Fronts propagating with curvature-dependent speed: Algorithms based on Hamilton-Jacobi formulations. J Comput Phys, 1988, 79:12

170 Paillere H, Degrez G And Deconinck H. Multidimensional upwind schemes for shallow water equations. Inter J Numer Methods in Fluids, 1998, 26:987～1000

171 Pan D and Cheng J C. A second-order upwind FVM for the Euler solution on unstructured triangular meshes. Inter J Numer Method in Fluids, 1993, 16:1079～1098

172 帕坦卡(Patankar S V). 传热和流体流动的数值方法,安徽 科学技术出版社,1984

173 Peterson T. A Note on the convergence of the discontinuous Galerkin method for a scalar hyperbolic equation. SIAM J Numer Anal, 1991, 28:133～140

174 Quarteroni A and Valli A. Numerical Approximation of Partial Differential Equations, Springer-Verlag, 1997

175 Raviart P A and Thomas J M. A finite element method for second order elliptic problems in mathematical aspects of the finite element method, Lecture Notes in Math, Springer-verlag, Berlin, 1977

176 Rebay S. Efficient unstructured mesh generation by means of Delaunay Triangulation and Bowyer-Watson algorithm. J Comput Phys, 1993, 106:125～138

177 Reed W H and Hill T R. Triangular mesh methods for the Neutron transport equation. LA Report, 1973

178 Reddy J N. Applied Functional Analysis and Variational Methods in Engineering, McGraw-Hill Book Company, 1986

179 Reddy B D. Introductory Functional Analysis with Applications to BoundaryValue Problems and Finite Elements, (Texts in Applied Mathematics 27), Springer, 1998; 世界图书出版公司

180 Richter G R. The discontinuous Galerkin method with diffusion. Math Comp, 1992, 58:631～643

181 Richtmyer R D and Morton K W. Difference Methods for Initial Value Problems, Interscience Publishers, Wiley & sons, 1967

182 Rider W J and Kothe D B. Reconstructing volume tracking. J Comput Phys, 1998, 141:112～152

183 Roache P J. Computational Fluid Dynamics, Hermosa Publishers, 1976

184 Roe P L. Approximate Riemann solvers, parametervectors, and difference schemes. J of Comput Phys, 1981, 43:357～372

185 Roe P L. Numerical algorithms for the linear wave equation. Royal Aircraft Establishment Technical Report 81047,1981

186 Roe P L. Discrete models for numerical analysis of time-dependent multidimensional Gas dynamics. J of Comput Phys, 1986, 63:458～476

187 Roe P. Linear bicharacteristic schemes without dissipation. SIAM J Sci Comput, 1998, 19-5:1405～1427

188 Rudman M. Volume-tracking methods for interfacial flow calculations. Inter J Numer. Methods in Fluids, 1997, 24:671～691

189 Rudman M. A volume-tracking method for incompressible multifluid flows with large density variations. Inter J Numer. Methods in Fluids, 1998, 28:357～378

190 Ru-Xun Liu, Hong Li, et al. The discontinuous finite element method for red-and-green light models for the traffic flow. Mathematics and Computers in Simulation, 2001, 56-1: 55～67

191 Santes J and Oliveirna P. A converging finite volume scheme for hyperbolic conservation laws with source terms. J Comput. Appl Math, 1999, 111:239～251

192 Saurel R and Massont J. On Riemann-problem-based methods for detonations in solid energetic materials. Inter J Numer Methods in Fluids. 1998, 26:101～121

193 Sethian J A and Strain J. Crystal growth and dendritic solidification, J Comput Phys, 1992, 98:231

194 Sethian J A. Theory, algorithms, and applications of level set methods for propagating interface. Acta Numerica, Cambridge Univ. Press, Cambridge UK, 1995

195 Sethian J A. Level set methods: evolving interfaces in geometry, Fluid Mechanics, Computer Vision and Material Sciences, Cambridge Univ. Press, Cambridge, UK, 1996

196 Shi J, Hu C and Shu C-W. A technique of treating negative weights in WENO schemes. NASA/CR-2000-2110632; ICASE Report No.2000-49

197 Shu C W. TVB uniformly high-order sehemes for conservation laws. Math Comp, 1987, 49:105～121

198 Shu C-W and Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shock-capturing schemes. J Comput Phys, 1988, 77:439

199 Shu C W, Osher S. Efficient implementation of essentially non-oscillatory shocks capturing schemes II. J Comput Phys, 1989, 83:32～78

200 Shu C-W. Numerical experiments on the accuracy of ENO and modified ENO schemes. J Sci Computing, 1990, 5-2:127～149

201 Shu C-W et al. High order ENO schemes applied to two- and three- dimensional compressible flow. Applied Numerical Mathematics, 1992, 9:45～71

202 Shu C-W, Zang T A et al. High-order ENO schemes applied to two- and three-dimen-

sional compressible flow. Applied Numer Math, 1992, 9:45～54

203 Shu C-W Essentially non-oscillatory and weighted essentially nonoscillatory schemes for hyperbolic conservation laws. NASA/CR-97-206253, ICASE Report No.97-65

204 Shu C-W. Preface to the Republication of "Uniformly High Order Essentially Non-oscillatory Schemes, III," by Harten, Engquist, Osher, and Chakravarthy. J Comput Phys, 1997, 131:1～2

205 Shu C-W. High Order ENO and WENO Schemes, in "High Order Methods for Computational Physics"(Eds:Barth T J and Deconinck H.) Lecture Notes in Computational Science and Engineering (9), Springer-Verlag, 1999

206 Sod G A. A survey of several finite difference methods for systems of nonlinear hyperbolic conservation laws. J Comput Phys, 1978, 27:1～32

207 Song Young Joon. Adjacency for grid generation and grid adaptation in Delaunay triangular. J Comput Phys, 1997, 150:57～64

208 Srinivas K. An explicit finite volume spatial marching method for reduced Navier-Stokes equations. Int J Numer. Method. in Fluids, 1995, 22:121～135

209 Stanescu D and Habashi W G. Essentially non-oscillatory Euler solutions on unstructured meshes using extrapolation. AIAA J, 1998, 30:1413～1416

210 Strain J. Semi-Lagrangian methods for Level Set equations. J Comput Phys, 1999, 151: 498～533

211 Strain J. Tree methods for moving interfaces. J Comput Phys, 1999, 151:616～648

212 Strain J. Fast tree-based redistancing for level set computations. J Comput Phys, 1999, 152:664～686

213 Strouboulis T, Devloo D and Oden J T. A moving-grid finite element algorithm for supersonic flow interaction between moving bodies. Comput Meth Appl Mech and Engr, 1986, 59:235～255

214 孙澈,张阳等. 对流扩散问题的流线扩散有限元分析. 计算数学,1996, 18-3:253～260

215 Sun Che and Shen Hui. Finite difference stramline diffusion method for time-dependent convection-diffusion equations. Numer Math (in China), 1998, 7-1:72～85

216 Sussman M, Smereka P and Osher S. A level set approach for computing solutions to incompressible two-phase flow. J Comput Phys, 1994, 114:146～159

217 Sweby P K. High resolution schemes using flux limiters for hyperbolic conservation laws. SIAM J Numer Anal, 1984, 21:995～1011

218 Szepessy A. Convergence of a shock-capturing streamline diffusion finite element method for a scalar conservation law in two-space dimensions. Math Comp, 1989, 53-188:527～545

219 TamamidisP. A new upwind scheme on triangular meshes using the finite volume method. J Comput Methods in Appl Mech Engrg, 1995, 124:15～31

220 谭维炎. 计算浅水动力学——有限体积法的应用,清华大学出版社,1998

221 Thomas J W. Numerical Partial Differential Equations, Springer, 1995

222 Thompson J E. (Ed.) Numerical Grid Generation, North-Holland, Amsterdam, Holland, 1982

223 Toro E F. Riemann Solvers and Numerical Methods for Fluid Dynamics, Springer-Verlag, 1997

224 Toro E F Spruce M and Spearce W. Restoration of the contact surface in the HHL-type Riemann Solver. Shock Waves, 1994, 4:25~34

225 Trefethen L N. Group velocity in finite difference schemes. SIAM Review, 1982, 24-2: 113

226 Ubbink O And Issa R I. A method for capturing sharp fluid interfaces on arbitrary meshes. J Comput Phys, 1999, 153:26~50

227 Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme, II. Monotonicity and conservation combined in a second order scheme. J Comp Phys, 1974, 14:361~370

228 Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme III. Upstream-centered finite difference schemes for ideal compressible flow. J Comput Phys, 1977, 23:263

229 Van Leer B. Towards the ultimate conservative difference scheme IV. A new approach to numerical convection. J Comput Phys, 1977, 23:276

230 Van Leer B Towards the ultimate conservative difference scheme V. A second order sequel to Godunov's method. J Comput Phys, 1979, 32:101

231 Versteeg H K and Malalasekera W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics—The Finite Volume Method, Longman Group Ltd, 1995

232 Vichnevetsky R and Bowles J B. Fourier Analysis of Numerical Approximations of Hyperbolic Equations, SIAM Philadephia, 1982

233 Vincent S and Caltagirone J P. Efficient Solving method for unsteady incompressible interfacial flow problems. Int J Numer Meth Fluids, 1999, 30:795~811

234 Voronoi G. Nouvelles applications des parameteres continus a la theorie des formes quadratiques. J Angrew Math, 1907, 133:97~178

235 Voronoi G. Nouvelles applications des parametres continus a la theorie des formes quadratiques. J Angrew Math, 1908, 134:167~171

236 汪继文,刘儒勋. 间断解问题的有限体积法. 计算物理, 2001, 18:97~105

237 Wang Z and Richards B E. High resolution schemes for steady flow computation. J Comput Phys, 1991, 97:53~72

238 Warming R F and Hyett B J. The modified equation approach to the stability and accuracy analysis of finite difference method. J Comput Phys, 1974, 14:159

239 Wathen A J. Mesh-independent spectra in the moving finite element equations. SIAM J Numer Anal, 1986, 23-4:797~814

240 Watson D F. Computing the n-dimensional Delaunay tessellation with applications to

Voronoi polygons. Computer J, 1981, 24:167～172

241 Weinan E and Shu C-W. A numerical resolution study of high order essentially non-oscillatory schemes applied to incompressible flow. J Comput Phys, 1994, 110-1:39

242 Whitham G B. Linear and Nonlinear Wave, Wiley, 1974

243 Wood W A and Kleb W L. Diffusion characteristics of finite volume and fluctuation splitting schemes. J Comput Phys, 1999, 153:353～377

244 Woodward P and Colella P. The numerical simulation of two-dimensional fluid flow with strong shocks. J Comput Phys, 1984, 54:115～173

245 Woodward P R and Colella P. High resolution difference schemes for compressible gas dynamics. Lecture Notes in Physics 141, Springer-Verlag, New York, 1979

246 忻孝康,刘儒勋,蒋伯诚. 计算流体动力学,国防科学技术大学出版社,1989

247 Yan Jue and Shu C-W. A local discontinuous Galerkin method for KdV-type equations. ICASE Report No. 2001, 2001-20

248 Yanenko N N. The method of fractional steps, Springer-Verlag, 1971

249 Yee H C Warming R F and Harten A. Implicit TVD schemes for steady state calculations. J Comput Phys, 1985, 57:327

250 Yee H C. Construction of explicit and implicit symmetric TVD schemes and their applications. J Comput Phys, 1987, 68:151～179

251 应隆安,滕振寰. 双曲形守恒律方程及其差分方法,科学出版社,1991

252 Youngs D L, Numerical methods for fluid dynamics, (Eds: K W Morton & M J Baineks), Academic, New York, 1982

253 Zabusky N J and Kruskal M D. Interaction of solitons in a collisionless plasma and the recurrence of initial states. Phys Rev Lett, 1965, 6:240

254 Zachary A L and Colella P. A high order Godunov mehtod for the equations of ideal magnetohydrodynamics. J Comput Phys, 1992, 99:341

255 Zalesak S T. Fully multi-dimensional flux corrected transport algorithms for fluid flow. J Comput Phys, 1979, 31:335～362

256 Zhang Qiang and Sun Che. FDSD method for nonlinear convection-diffusion equation. Math Numer Sinica, 1998, 20-2:211～224

257 Zhang Qiang and Sun Che. Predictor-corrector FDSD method for nonlinear convection-diffusion equation. Math Numer Sinica, 1999, 21-3:363～374

258 Zhao H K, Chan T, Merriman B and Osher S. A variational level set approach to multiphace motion. J Comput Phys, 1996, 127:179

附　　录

四个求差分格式的 Modified PDE 的 MATHEMATICS 程序

```
(* Program 1                                    *)
(* This program generates the MPDE of a finite difference scheme

for the governing equation: u_t + a u_x = 0    *)

Clear[fds, order, level, mpde, expfds];
Clear[exp, e, g, tmp, media, k, l, i, m];
Clear[t, x, c, a];

(* Please input the following information. Here and in the other 3
        prgrams, "fds" means the left - hand side composed of all the non -
        zero terms in a finite difference scheme, "order" means the highest
        order
                you want to obtain in the remainder of the MPDE, "lev-
                el" means the level number of the finite difference
                scheme. Please refer to the description of the algorithm
                in Page 13.                          *)

(* Notice : Please input U[j, n] to denote u_j^n and so on. For example, suppose

        that you want to achieve the 5th order in the remainder of the MPDE
        for Upwind scheme, you input :
        fds= U[j, n + 1] - U[j, n] + c*(U[j, n] - U[j - 1, n]);
        order= 5;
        level= 2;                                    *)
fds=    ;
order=    ;
```

```
level=    ;

(* If you have completed the input, please execute the menus command
                        " Kernel→ Evaluation→ Evaluate Notebook ". Now be-
                        gin computing *)
cfds= Simplify[fds];
tmpexp= Series[u[x, t], {x, xj, order}, {t, tn, order}];
media= Normal[tmpexp];
For[i= 1, i ≤ order, i+ + , For[m= 1, m ≤ order, m+ + , tmp= media;
                    media=If[i + m > order, tmp /. {Derivative[i, m][u][xj,
                    tn] → 0}, tmp];]];
media ;
exp[k  , l  ]= media /. {x → (xj) + k * ( dx), t → (tn) + l * ( dt)};

expfds= 0;
For[n0= -level + 2, n0 ≤ 1, n0+ + , For[j0= -6, j0≤ 6, j0+ + , tmp
 = expfds;
                        expfds= tmp + Coefficient[cfds, U[j + j0, n + n0]]
                        *exp[j0, n0]]];
tmp= Simplify[expfds];
expfds= Collect[tmp, u];
tmp= expfds /. {xj → x, tn → t};

expfds= Cancel[(tmp /. {c → (a dt)/dx})/Coefficient[tmp, u^(0,1)[x, t]]];

tmp= Simplify[expfds];
mpde= Expand[tmp];

Array[e, {order, order + 1}];
Array[g, {order, order + 1}];
For[n= 1, n ≤ order, n+ + , For[k= 1, k ≤ n + 1, k+ + ,
                    e[n, k]= Coefficient[tmp, Derivative[k - 1, n - k + 1]
                    [u][x, t]];]];
For[n= 2, n ≤ order, n+ + ,
            For[k= 1, k ≤ n, k+ + ,
```

```
                For[m= n, m ≤ order, m+ + ,
                For[j= k, j ≤ m + k + 1 - n, j+ + ,
                        g[m, j]= e[m, j] - e[m - n + 1, j - k
                        + 1] * e[n, k];] ];
            For[m= n, m ≤ order, m+ + ,
                    For[j= k, j ≤ m + k + 1 - n, j+ + ,
                            e[m, j]= g[m, j]  ;    ]]    ]]
mpde= 0;
For[n= 1, n ≤ order, n+ + ,
            For[k= 1 , k ≤ n + 1, k+ + ,
                    g[n, k]= Factor[e[n, k] /. {dt → c * dx/a}];
                        mpde= mpde + g[n, k] * Derivative[k - 1, n
                        - k + 1]u[x, t];]];
Print["0= ", mpde]
```

```
(* Program 2                         *)
(* This program generates the t - MPDE of a finite difference scheme

        for the governing equation : u_t + au_x = 0   *)

Clear[fds, order, level, mpde, expfds];
Clear[exp, e, g, tmp, media, k, l, i, m];
Clear[a, c, x, t];

(* Please input the following information *)
fds=   ;
order=   ;
level=   ;

(* If you have completed the input, please execute the menus command
                    "Kernel→ Evaluation→ Evaluate Notebook". Now be-
                    gin computing   *)
```

```
cfds= Simplify[fds];
tmpexp= Series[u[t, x], {t, tn, order}, {x, xj, order}];
media= Normal[tmpexp];
For[i= 1, i <= order, i++, For[m= 1, m <= order, m++, tmp= media;
        media = If[i + m > order, tmp /. {Derivative[i, m][u][tn,
        xj] -> 0}, tmp];]];
media ;
exp[k_, l_]= media /. {x -> (xj) + k*(dx), t -> (tn) + l*(dt)};

expfds= 0;
For[n0= -level + 2, n0 <= 1, n0++, For[j0= -6, j0 <= 6, j0++, tmp
        = expfds;
        expfds= tmp + Coefficient[cfds, U[j + j0, n + n0]] * exp
        [j0, n0]]];
tmp= Simplify[expfds];
expfds= Collect[tmp, u];
tmp= expfds /. {xj -> x, tn -> t};

expfds= Cancel[(tmp /. {c -> (a dt)/dx})/Coefficient[tmp, u^(0,1)[t, x]]];
tmp= Simplify[expfds];
mpde= Expand[tmp];

Array[e, {order, order + 1}];
Array[g, {order, order + 1}];
For[n= 1, n <= order, n++, For[k= 1, k <= n + 1, k++,
        e[n, k]= Coefficient[tmp, Derivative[k - 1, n - k + 1]
        [u][t, x]];]];

For[n= 2 , n <= order, n++,
    For[k= 1, k <= n, k++,
        For[m= n, m <= order, m++,
            For[j= k, j <= m + k + 1 - n, j++,
                g[m, j]= e[m, j] - e[m - n + 1,
                j - k + 1]*e[n, k];] ];
```

```
        For[m= n, m ≤ order, m+ + ,
                    For[j= k, j ≤ m + k + 1 - n, j+ + ,
                            e[m, j]= g[m, j]  ;    ]]    ]]
mpde= 0;
For[n= 1, n ≤ order, n+ + ,
        For[k = 1, k ≤ n + 1, k+ + ,
            g[n, k]= Factor[e[n, k] /. {dx → a * dt/c}];
                mpde= mpde + a * g[n, k] * Derivative[k - 1, n -
                k + 1][u][t,x];]];
Print["0 = ", mpde]
(* Program 3                    *)
(*This program generates the MPDE of a finite difference scheme for the 2D
  governing equation :u_t + au_x + bu_y =0   *)

Clear[f, fds, order, level, mpde, expfds];
Clear[exp, tmp, media, k, l, r, j, n, i, m];
Clear[a, b, c1, c2, xi, yj, tn];

(* Please input the following information   *)
fds=   ;
order=   ;
level=   ;

(* If you have completed the input, please execute the menus command
                " Kernel→ Evaluation→ Evaluate Notebook ". Now be-
                gin computing  *)

cfds= Simplify[fds];
tmpexp= Series[u[x, y, t], {x, xi, order}, {y, yj, order}, {t, tn, order}];
media= Normal[tmpexp];
For[p= 0, p ≤ order, p+ + , For[m= 0, m ≤ order, m+ + ,
 For[q= 0, q ≤ order, q+ + , tmp= media;
  media=
        If[p + q + m > order, tmp /. {Derivative[p, m, q][u][xi, yj,
        tn] → 0}, tmp];]]];
```

```
media;
exp[k_, l_, r_]= media /. {x → (xi) + k*(dx), y → (yj) + l*(dy),
t → (tn) + r*( dt)};

expfds= 0;
For[n0 = -level + 2, n0 ≤ 1, n0++, For[i0= -3, i0 ≤ 3, i0++,
       For[j0= -3, j0 ≤ 3, j0++, tmp= expfds;
              expfds=tmp + Coefficient[cfds, U[i + i0, j + j0, n + n0]]
              * exp[i0, j0, n0]]]];
tmp= Simplify[expfds];
expfds= Collect[tmp, u];
tmp= expfds /. {xi → x, yj → y, tn → t};

mpde= tmp /. {c1 → a*(dt)/(dx), c2 → b*(dt)/(dy)};
expfds= Cancel[mpde/Coefficient[mpde, Derivative[0, 0, 1][u][x, y, t]]];
tmp= Simplify[expfds];
mpde= Expand[tmp] ;

For [k= 2, k ≤ order, k++,
    For[l= k, l ≥ 1, l--, For[m= 0, m ≤ k - 1, m++,
              tmp= Simplify[ mpde - Coefficient[mpde, Derivative[k - m
                                  - 1, m, l][u][x, y, t]] *
                                  D[mpde, {x, k - m - 1}, {y, m},
                                  {t, l - 1}]];
    mpde= Expand[tmp];
       For[p=0, p ≤ order + k, p++,
              For[r= 0, r ≤ order + k, r++, For[q= 0, q ≤ order + k,
              q++,
          tmp= mpde;
                 mpde= If[p + q + r > order, tmp /. {Derivative[p, r,
                    q][u][x, y, t] → 0},
                    tmp];]]];
                                  ];];];
```

```
tmp = Simplify[mpde /. Dt->c1 * dx / a];

For[k = 2, k <= order, k + + , For[m = 0, m <= k, m + + ,
        mpde = tmp; tmp = Collect[mpde, Derivative[k - m, m,
        0][u][x, y, t]];]];
mpde = tmp;
Print["0 = ", mpde]
```

```
(* Program 4                                   *)
(* This program generates the MPDE of a finite difference scheme
   for the linear system : V_t + AV_x = 0, where V = (u, w)^T, A = ((a1, a2), (b2, b1)) *)
```

for the linear system : $V_t + AV_x = 0$, where $V = \begin{pmatrix} u \\ w \end{pmatrix}$, $A = \begin{pmatrix} a1 & a2 \\ b2 & b1 \end{pmatrix}$

```
Clear[fds1, fds2, mpde1, mpde2, tylor1, tylor2, order, level,
        expfds1, expfds2, cfds1, cfds2];
Clear[exp1, exp2, tmp, tmp1, tmp2, media1, media2, tmpexp1, tmpexp2,
      k, l, i, m];
clear[x, t. u, w, U, W, c1, c2, d1, d2, a1, a2, b1, b2];

(* Please input the following information. Here "fds1" means the left - hand
        side of the finite difference approximation for the first
        governing equation, "fds2" means that for the second
        governing equation.      *)
(* Notice : Please input U[j, n] to denote u_j^n, W[j, n] to denote w_j^n, and so
        on.      *)

fds1 = ;
fds2 = ;
order = ;
level = ;
```

16.3 重新初始化方程的求解

方程(16.9)是 Hamilton-Jacobi 方程,我们当然可以采用 16.2 中的方法,这里介绍两种 Godunov 方法. 首先将方程(16.9)写成如下形式

$$\varphi_\tau + \left(\frac{S(\varphi_0)\varphi_x}{\sqrt{\varphi_x^2+\varphi_y^2}}\right)\varphi_x + \left(\frac{S(\varphi_0)\varphi_y}{\sqrt{\varphi_x^2+\varphi_y^2}}\right)\varphi_y = S(\varphi_0), \tag{16.20}$$

其中 $S(\varphi_0)$是符号函数 $\mathrm{sign}(\varphi_0)$,我们取其光滑化为

$$S_\varepsilon(\varphi_0) = \frac{\varphi}{\sqrt{\varphi^2+\Delta x^2}}. \tag{16.21}$$

1. 一阶、单调 Godunov 格式[35,162]

一种比较简单的一阶、单调格式可描述如下

$$\varphi_{i,j}^{n+1} = \varphi_{i,j}^n - \Delta\tau S_\varepsilon(\varphi_{0,i,j})G(\varphi_{i,j}^n), \tag{16.22}$$

其中

$$S_\varepsilon(\varphi_{0,i,j}) = \frac{\varphi_{0,i,j}}{\sqrt{\varphi_{0,i,j}^2+\Delta x^2}}.$$

$$G(\varphi_{i,j}^n) = \begin{cases} \sqrt{\max((a^+)^2,(b^-)^2)+\max((c^+)^2,(d^-)^2)}-1, & \varphi_{0,i,j}>0, \\ \sqrt{\max((a^-)^2,(b^+)^2)+\max((c^-)^2,(d^+)^2)}-1, & \varphi_{0,i,j}<0, \\ 0, & \text{否则}, \end{cases}$$

$$a = (\varphi_{i,j}-\varphi_{i-1,j})/h, \qquad b = (\varphi_{i+1,j}-\varphi_{i,j})/h,$$
$$c = (\varphi_{i,j}-\varphi_{i,j-1})/h, \qquad d = (\varphi_{i,j+1}-\varphi_{i,j})/h.$$

而 $z^+ = \max(z,0)$, $z^- = \min(z,0)$.

2. 修正的 Godunov 方法[72]

为了提高精度,我们由 ENO 或 WENO 方法构造从左侧和右侧的导数离散值 φ_x^+, φ_x^- 分别是来代替一阶 Godunov 方法中的前差分和后差分 a,b,c,d. 时间导数离散采用二阶或三阶 TVD-Runge-Kutta 方法.

首先定义

$$s = \frac{S(\varphi_0)(|\varphi_x^+|-|\varphi_x^-|)}{\varphi_x^+-\varphi_x^-}, \tag{16.23}$$

对 φ_x 作如下离散

```
  tmp2 = expfds2;
    expfds2 = tmp2 + Coefficient[cfds2, W[j + j0, n + n0]] *
         exp2[j0, n0];]];
tmp = Simplify[expfds1];
expfds1 = Collect[tmp, u];
tmp = expfds1 /. {xj→x, tn→t};
```

$$\text{expfds1} = \text{Cancel}\left[\frac{\text{tmp/.}\left\{d1 \to \frac{a1 * dt}{dx}, c1 \to \frac{a2 * dt}{dx}\right\}}{\text{coefficient}[\text{tmp}, u^{(0,1)}[x, t]]}\right];$$

```
tmp = Simplify[expfds2];
expfds2 = Collect[tmp, w];
tmp = expfds2 /. {xj→x, tn→t};
```

$$\text{expfds2} = \text{Cancel}\left[\frac{\text{tmp/.}\left\{d2 \to \frac{b1 * dt}{dx}, c2 \to \frac{a2 * dt}{dx}\right\}}{\text{coefficient}[\text{tmp}, w^{(0,1)}[x, t]]}\right];$$

```
tmp = Simplify[expfds1];
tylor1 = Expand[tmp];
tmp = Simplify[expfds2];
tylor2 = Expand[tmp];

mpde1 = tylor1;
mpde2 = tylor2;

For[k = 2, k ≤ order, k++, For[l = k, l ≥ 1, l--,
```

tmp1 = Simplify[mpde1 - Coefficient[mpde1, $u^{(k-l,l)}[x,t]$]
$\partial_{\{x,k-1\},\{t,l-1\}}$tylor1];

mpde1 = Expand[tmp1];

tmp2 = Simplify[mpde1 - Coefficient[mpde1, $w^{(k-l,l)}[x,t]$]
$\partial_{\{x,k-1\},\{t,l-1\}}$tylor2];

```
        mpde1 = Expand[tmp2];
        For[p = order + 1, p ≤ order + k, p++, For[q = p, q ≥
        0, q--,
```

tmp= mpde1 /. $\{u^{(p-q,q)}[x,t]\to 0,\ w^{(p-q,q)}[x,t]\to 0\}$;
mpde1 = tmp;];];];];

tmp= Simplify[mpde1];

For[k = 2, k ⩽ order, k+ +, mpde1 = tmp; tmp= Collect[mpde1, $u^{(k,0)}$[x, t]];
mpde1 = tmp; tmp= Collect[mpde1, $w^{(k,0)}$[x, t]];];
mpde1 = tmp;
For[k=2, k ⩽ order, k+ +, For[l= k, l ⩾ 1, l- -,
tmp1 = Simplify [mpde2-Coefficient [mpde2, $u^{(k-l,l)}$ [x, t]] $\partial_{\{x,k-l\},\{t,l-1\}}tylor1$];
mpde2 = Expand[tmp1];
tmp2 = Simplify [mpde2-Coefficient [mpde2, $w^{(k-l,l)}$ [x, t]] $\partial_{\{x,k-l\},\{t,l-1\}}tylor2$];
mpde2 = Expand[tmp2];
For[p= order+1, p⩽ order+k, p+ +, For[q= p, q ⩾ 0, q- -,
tmp=mpde2/. $\{u^{(p-q,q)}[x,t]\to 0,\ w^{(p-q,q)}[x,t]\to 0\}$;
mpde2= tmp;];];];];

tmp= Simplify[mpde2];
For[k = 2, k ⩽ order, k+ +, mpde2= tmp; tmp= Collect[mpde2, $u^{(k,0)}$[x, t]];
mpde2= tmp; tmp= Collect[mpde2, $w^{(k,0)}$[x, t]];];
mpde2= tmp;
Print["0=", mpde1]
Print["0=", mpde2]